FISICA TEORICA

Parte 1

Richiami di meccanica analitica classica

CAPITOLO 1

Meccanica del punto materiale

1.1. Le equazioni di Lagrange

La meccanica di Newton, basata sulla legge del moto $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$, si può formulare in qualunque sistema di coordinate che si voglia adottare per descrivere il moto. Per il moto di un punto materiale soggetto a forza conservativa $\mathbf{F} = -\nabla V$ possiamo adottare coordinate cartesiane $\{x_i,\ i = 1,2,3\}$ oppure coordinate generali, ad esempio coordinate polari $\{r, \vartheta, \varphi\}$, legate alle cartesiane da trasformazioni differenziabili $\{x = r\sin\vartheta\cos\varphi,\ y = r\sin\vartheta\sin\varphi,\ z = r\cos\vartheta\}$ (si veda l'App. B.3 e per un'informazione più completa [**MS61**]). Le equazioni del moto assumono allora forme differenti, del tutto equivalenti dal punto di vista fisico: Track 1

$$m\ddot{x}_i = -\frac{\partial V}{\partial x_i} \quad (i = 1,2,3)$$

oppure

$$\begin{cases} m\,\ddot{r} = -\dfrac{\partial V}{\partial r} + m\,r\,\dot{\vartheta}^2 + m\,r\,\sin^2\vartheta\,\dot{\varphi}^2 \\ m\,\ddot{\vartheta} = \dots \\ m\,\ddot{\varphi} = \dots \end{cases}$$

(completare per esercizio le rimanenti equazioni del moto – si apprezzerà maggiormente il metodo lagrangiano che svilupperemo nel seguito).

L'adozione di coordinate generali è conveniente per semplificare le equazioni del moto (ad esempio per un campo di forze centrali non compaiono termini del tipo $\partial V/\partial\vartheta$ né $\partial V/\partial\varphi$), ma il lavoro necessario per esplicitare le equazioni può diventare rilevante. Per semplificare questo compito conviene utilizzare il formalismo di **Lagrange**. Le equazioni del moto si possono porre nella forma generale

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial \dot{q}^i} = \frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial q^i}\,, \tag{1.1}$$

dove le variabili $\{q^i, i = 1,2,3\}$ costituiscono una scelta qualunque di coordinate generali e la funzione $L(q,\dot{q})$, detta la **Lagrangiana** del problema, è definita dalla *differenza* tra energia cinetica ed energia potenziale

$$L = T - V\,.$$

Nell'uso di coordinate curvilinee è necessario distinguere tra componenti *controvarianti* identificate con un indice in alto (come q^i) e componenti *covarianti* identificate invece con indice basso (p_i); sotto un cambiamento di coordinate si intende che le componenti covarianti si trasformano in modo che $\sum_i p_i\, dq^i$ rimane invariante. In base ad una convenzione universalmente adottata (da **Einstein** in poi), si ometteranno i simboli di somma su indici ripetuti. Se ci si limita alle coordinate cartesiane e a trasformazioni ortogonali non vi è differenza tra indici alti e bassi, ma in generale è necessario tenere conto della differenza.

L'energia cinetica, che in coordinate cartesiane è data semplicemente da

$$T = \sum_{i=1}^{3} \tfrac{1}{2} m \dot{x}_i^2 \equiv \tfrac{1}{2} m \dot{x}_i \dot{x}^i \,,$$

è facilmente riespressa in coordinate generali q^i dove assume la forma

$$T = \tfrac{1}{2} m\, g_{ij}(q) \dot{q}^i \dot{q}^j \,.$$

La forma quadratica T è caratterizzata dalla matrice $g_{ij}(q)$, detta la **matrice metrica** (o semplicemente la *metrica*), definita da

$$g_{ij}(q) = \frac{\partial x_k}{\partial q^i} \frac{\partial x^k}{\partial q^j} \,. \tag{1.2}$$

In generale per un sistema di n particelle interagenti con forze conservative definite dall'energia potenziale $V(q_\alpha^1, ..., q_\alpha^n)$ la Lagrangiana sarà definita da

$$L(q, \dot{q}) = \tfrac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{n} \sum_{i,j=1}^{3} m_\alpha\, g_{ij}(q_\alpha) \dot{q}_\alpha^i \dot{q}_\alpha^j - V(q) \,.$$

Le equazioni del moto sono date dalla estensione a n gradi di libertà della (1.1), e cioè

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L(q, \dot{q})}{\partial \dot{q}_\alpha^i} = \frac{\partial L(q, \dot{q})}{\partial q_\alpha^i} \,, \ (i = 1, 2, 3; \alpha = 1, ..., n) \,. \tag{1.3}$$

La validità delle equazioni di Lagrange è molto più ampia di quanto esposto finora. La forma (1.3) si applica anche in presenza di vincoli *olonomi*, esprimibili cioè da relazioni del tipo

$$\Phi_r(q) = 0 \ \ (r = 1, ..., p)$$

a patto di introdurre coordinate generali $q^1, ..., q^{3n-p}$ che tengano conto esplicitamente dei vincoli, oppure ancora con il metodo dei moltiplicatori di Lagrange, come è noto dalla meccanica razionale. Il vantaggio della formulazione lagrangiana delle equazioni del moto si può dunque riassumere nel fatto che la forma (1.3) si applica a qualunque scelta delle coordinate generali, il che permette di sorvolare sul problema di identificare le *forze*

di inerzia e le *reazioni vincolari*. Non dimostreremo ora quanto affermato, assumendone la conoscenza dalla meccanica razionale; ne daremo tuttavia in seguito (§1.3) una derivazione a partire dal principio variazionale. Ci interessa sottolineare l'ulteriore estensione della applicabilità delle equazioni di Lagrange a forze derivabili da potenziali dipendenti dalla velocità. Ciò permette di rappresentare nel formalismo di Lagrange anche le forze elettromagnetiche (vedi il §3.3).

PROBLEMA 1.1-1 []Dimostrare che, in base alla definizione di g_{ij}, la quantità $g_{ij}\, dq^i\, dq^j$ risulta invariante rispetto a trasformazioni generali di coordinate $q^i \to Q^i = f^i(q)$.

PROBLEMA 1.1-2 [] Ricavare la matrice metrica per i sistemi di coordinate

i) *sferiche* $(r, \vartheta\, \varphi)$

ii) *paraboliche*

$$\begin{cases} x = \frac{1}{2}(\xi^2 - \eta^2)\cos\varphi \\ y = \frac{1}{2}(\xi^2 - \eta^2)\sin\varphi \\ z = \xi\eta \end{cases}$$

iii) *ellissoidali*

$$\begin{cases} x = \rho\cosh\tau\cos\varphi \\ y = \rho\cosh\tau\sin\varphi \\ z = \rho\sinh\tau \end{cases}$$

SOLUZIONE *[]*

i)

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2\sin^2\vartheta \end{pmatrix}$$

ii)

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} \xi^2+\eta^2 & 0 & 0 \\ 0 & \xi^2+\eta^2 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4}(\xi^2-\eta^2)^2 \end{pmatrix}$$

iii)

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} \cosh^2\xi, + \sinh^2\tau & 0 & 0 \\ 0 & \rho^2(\cosh^2\xi, + \sinh^2\tau) & 0 \\ 0 & 0 & \rho^2\cosh^2\tau \end{pmatrix}$$

PROBLEMA 1.1-3 [] Scrivere le equazioni del moto per una particella vincolata a scivolare senza attrito su una superficie sferica sotto l'azione della forza di gravità.

PROBLEMA 1.1-4 []Consideriamo un sistema meccanico costituito da due masse puntiformi identiche connesse da un filo inestendibile e di massa

trascurabile. La prima particella si muove senza attrito su di un piano orizzontale; il filo passa attraverso un foro nel piano e la seconda massa si muove verticalmente sotto l'azione della gravità. Studiare il moto del sistema, nell'ipotesi che il moto della seconda massa sia ristretto alla direzione verticale.

1.2. Simmetrie e leggi di conservazione

Sebbene il formalismo di Lagrange non contenga alcun ingrediente fisico aggiuntivo rispetto alle leggi del moto di Newton, esso si presta a mettere più facilmente in evidenza eventuali **leggi di conservazione**. Il fatto fondamentale che illustreremo qui di seguito è costituito dalla stretta relazione esistente tra simmetrie del sistema meccanico e *integrali primi* del moto, relazione che nella sua forma generale va sotto il nome di **teorema di Noether** e che si incontrerà con qualche modifica nella formulazione di Hamilton e in meccanica quantistica. Procedendo attraverso un esempio, assumiamo di effettuare una trasformazione di coordinate

$$\mathbf{x} \to \mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{a} \tag{1.4}$$

su una Lagrangiana $L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})$. In generale la funzione L', definita da

$$L'(\mathbf{x}', \dot{\mathbf{x}}') \equiv L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})$$

sarà diversa dalla originale L, come funzione dei suoi argomenti. Ad esempio, se $L = \frac{1}{2}m(\dot{\mathbf{x}}^2 - \mathbf{x}^2)$ segue $L' = \frac{1}{2}m(\dot{\mathbf{x}}'^2 - (\mathbf{x}' - \mathbf{a})^2)$ che a differenza dalla L contiene termini lineari in $\mathbf{x}'$. Immaginiamo invece che L' e L siano la *stessa funzione* dei rispettivi argomenti: si dirà allora che la Lagrangiana è *invariante* sotto la trasformazione (1.4). Come immediata conseguenza, assumendo $\mathbf{a}$ infinitesimale e sviluppando in serie di Taylor, otteniamo

$$0 = L(\mathbf{x} - \mathbf{a}, \dot{\mathbf{x}}) - L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = \sum_i a_i \frac{\partial L}{\partial x^i} + O(a^2)$$

e dalla arbitrarietà di $\mathbf{a}$ si conclude perciò che

$$\frac{\partial L}{\partial x^i} \equiv 0$$

In base alle equazioni di Lagrange abbiamo allora

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^i} \equiv 0$$

il che esprime formalmente il fatto che tutte le componenti del vettore $\mathbf{p}$

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^i}$$

sono costanti del moto. Si è constatato perciò che l'invarianza della Lagrangiana sotto *traslazioni* implica la *conservazione del momento lineare*

$\mathbf{p}$. Ciò si verifica in particolare nel caso di un sistema costituito da n particelle interagenti con forze a due corpi con Lagrangiana del tipo

$$L = \frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{n} m_\alpha \dot{x}_\alpha^2 - \sum_{\alpha,\beta=1}^{n} V(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_\beta)$$

che risulta ovviamente invariante sotto traslazione; il corrispondente integrale primo del moto (momento lineare totale) è dato da

$$P_i = \sum_\alpha \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\alpha^i}$$

Più in generale, assumiamo che la Lagrangiana, funzione delle n variabili generali $\{q^1, \ldots, q^n\}$, sia invariante sotto un *gruppo* di trasformazioni del tipo

$$q^i \to q'^i = q^i + \varepsilon\, a^i(q)$$

dove ε è un parametro infinitesimale. Sviluppando in serie di Taylor avremo che la variazione di L al primo ordine in ε è data da

$$\delta L = \varepsilon\left(\frac{\partial L}{\partial q^i} a^i(q) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\frac{d}{dt} a^i(q)\right).$$

Sfruttando le equazioni del moto si arriva allora alla seguente relazione, che identifica l'esistenza di un integrale primo del moto:

$$\delta L = 0 \to \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} a^i(q)\right) = 0\,.$$

Si noti che le costanti del moto ottenute per questa via sono sempre costituite da funzioni lineari nelle quantità

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial q^i}\,.$$

A queste grandezze si dà il nome di **momenti coniugati** alle variabili Lagrangiane q^i. Costanti del moto più generali possono ovviamente esistere ma non sono legate a simmetrie del tipo considerato finora. Vedremo che la connessione tra simmetrie e costanti del moto si può ulteriormente generalizzare nel formalismo di Hamilton, dove l'insieme delle trasformazioni di coordinate verrà sostanzialmente allargato.

PROBLEMA 1.2-5 []Considerare una Lagrangiana invariante sotto una *rotazione* infinitesimale $\mathbf{x} \to \mathbf{x} + \varepsilon\boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{x}$; dimostrare che il corrispondente integrale primo del moto è dato dal *momento angolare* $\mathbf{x} \wedge \mathbf{p}$ dove $\mathbf{p}$ è il momento lineare ($p_i = m\dot{x}_i$).

PROBLEMA 1.2-6 []Dimostrare che per un sistema isolato costituito da n particelle interagenti con forze a due corpi derivabili da un potenziale $V = \sum_{\alpha,\beta} V(|\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_\beta|)$ la Lagrangiana è invariante per traslazioni $\mathbf{x}_\alpha \to \mathbf{x}_\alpha + \varepsilon\,\mathbf{a}$

e rotazioni $\mathbf{x}_\alpha \to \mathbf{x}_\alpha + \varepsilon\, \boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{x}_\alpha$. Dedurne la legge di conservazione per il momento lineare totale e per il momento angolare totale del sistema.

Un caso speciale di trasformazione è costituita dalla seguente

$$q^i(t) \to q'^i(t) = q^i(t+\tau)$$

dove t è il tempo e τ un parametro reale. Se il potenziale V che compare nella Lagrangiana non dipende esplicitamente dal tempo, la precedente equazione definisce una simmetria della Lagrangiana cui corrisponde una grandezza conservata. Infatti, considerando τ infinitesimale e omettendo per semplicità tutti gli indici, si ha

$$\begin{aligned} L(q(t+\tau), \dot{q}(t+\tau)) - L(q, \dot{q}) &= \tau\left(\frac{\partial L}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\ddot{q}\right) + O(\tau^2) \\ &= \tau\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\dot{q}\right) + O(\tau^2)\,. \end{aligned}$$

Ne segue che

$$\frac{d}{dt}\left(L - \dot{q}\,\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) = 0\,.$$

La quantità tra parentesi è un integrale primo del moto identificabile con l'*energia* del sistema. Si noti che in questo caso la trasformazione $q \to q + \tau\dot{q}$ non lascia strettamente invariante la Lagrangiana; tuttavia la variazione di L è data da una derivata totale di una funzione di $q, \dot{q}$. Questa circostanza corrisponde a una generalizzazione delle trasformazioni di simmetria per un sistema lagrangiano. È immediato verificare infatti che l'aggiunta a L di una derivata totale rispetto al tempo non altera le equazioni del moto e si può perciò ammettere nella definizione di trasformazione di simmetria. Questa proprietà delle equazioni di Lagrange risulterà evidente nella formulazione *variazionale* del prossimo paragrafo.

1.3. Principi variazionali

Il fatto che le equazioni del moto nella forma di Lagrange siano indipendenti dalla scelta delle coordinate rende plausibile che esista una loro interpretazione di tipo intrinseco. Per iniziare da un caso semplice, sappiamo che equazioni del tipo

$$\frac{\partial F}{\partial x^i} = 0$$

mantengono la loro forma sotto cambiamento di coordinate; se infatti poniamo $y^i = f^i(x)$ e indichiamo con G la funzione composta $G = F \circ f^{-1}$ (di modo che $G(y) \equiv F(x(y))$), le equazioni diventano

$$\frac{\partial G}{\partial y^i} = 0$$

ma questa proprietà di invarianza è del tutto naturale appena riconosciamo che le equazioni rappresentano le condizioni necessarie per l'esistenza di un punto di stazionarietà della funzione F, e questo fatto costituisce una caratteristica intrinseca della funzione, indipendente dai parametri che scegliamo per descriverla. Vedremo nel seguito come le leggi del moto si possano esprimere sinteticamente in termini di un principio di stazionarietà. Le ragioni profonde di questo fatto assai generale si devono peraltro ricercare al di fuori della meccanica classica; se ne darà un cenno nella App. A.1.

1.3.1. Principio di Eulero-Lagrange. Ora vogliamo mostrare che le equazioni di Lagrange esprimono proprio una condizione di stazionarietà per una "funzione" $S[q(t)]$, nota come l'**azione** del sistema meccanico. Consideriamo una qualunque traiettoria virtuale $q^i(t)$ del sistema; con ciò intendiamo una qualunque funzione continua e differenziabile $t \to (q^1(t), \dots, q^n(t))$ non necessariamente soluzione delle equazioni del moto, ma che rispetti gli eventuali vincoli presenti nel sistema (in genere questi vengono automaticamente tenuti in considerazione mediante la scelta di coordinate generali). Allora l'azione è definita da

$$S[q(t), t_1, t_2] = \int_{t_1}^{t_2} L(q(t), \dot{q}(t))\, dt\,.$$

Il valore di S dipende dagli infiniti valori assunti dalle funzioni $q^i(t)$ nell'intervallo (t_1, t_2) e dunque non si tratta di una ordinaria funzione di più variabili; per questo tipo di "funzione" si impiega il termine di *funzionale*. Precisiamo ora che cosa si intenda per *variazione* di $q(t)$ (l'analogo per traiettorie del concetto di differenziale dx): consideriamo per una data scelta $q(t)$ una traiettoria virtuale $q(t) + \delta q(t)$ dove $\delta q(t)$ è nulla al di fuori di un intervallo (τ_1, τ_2) interamente contenuto in (t_1, t_2), ossia $t_1 < \tau_1 < \tau_2 < t_2$. Limitandoci a piccole variazioni, e sviluppando la Lagrangiana in serie di Taylor, otteniamo

$$\begin{aligned}\delta S &= S[q(t) + \delta q(t)] - S[q(t)] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\frac{\partial L}{\partial q^i} \delta q^i(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \delta \dot{q}^i(t) \right) + O(\delta q)^2\,.\end{aligned}$$

Ora, $\delta \dot{q}^i = \dfrac{d}{dt} \delta q^i$ e perciò un'integrazione per parti ci dà

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt\, \delta q^i \left(\frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \right) + O(\delta q)^2$$

senza termini al contorno nell'integrazione per parti, in quanto per nostra assunzione $\delta q(t)$ è identicamente nulla al di fuori di (τ_1, τ_2). Constatiamo perciò che le soluzioni delle equazioni del moto corrispondono a quella

(o *quelle*) traiettorie virtuali intorno a cui l'azione $S[q]$ si mantiene stazionaria, nel senso che la variazione δS è infinitesima del secondo ordine rispetto alla variazione δq. Questo fatto esprime il cosiddetto "principio di minima azione" di Eulero e Lagrange e rende evidente la natura intrinseca della formulazione lagrangiana delle equazioni del moto.

PROBLEMA 1.3-7 []Determinare la curva piana congiungente due punti assegnati tale che la superficie ottenuta per rotazione della curva attorno ad un asse abbia area minima (si assume che l'asse sia complanare con i due punti e che questi giacciano nel medesimo semipiano rispetto all'asse).

SOLUZIONE *[]Se la curva è descritta da $y(x)$, essendo x la coordinata lungo l'asse di rotazione, dalla geometria elementare sappiamo che l'area della superficie di rotazione è data da*

$$A = 2\pi \int y(x)\, ds(x) = 2\pi \int y(x)\sqrt{1 + y'(x)^2}\, dx$$

Applichiamo perciò le equazioni di Eulero-Lagrange alla Lagrangiana

$$L(y, y') = y\sqrt{1 + y'^2}\,.$$

Dato però che x non compare esplicitamente nella Lagrangiana, esiste un integrale primo (equivalente all'energia nel caso della dinamica) rappresentato da

$$E = y' \frac{\partial L}{\partial y'} - L = \frac{y\, y'^2}{\sqrt{1 + y'^2}} - y\sqrt{1 + y'^2} = \textit{costante}\,.$$

Dopo semplificazioni elementari si ottiene

$$\frac{dy}{\sqrt{(y/E)^2 - 1}} = dx$$

*che ha per soluzione la catenaria $y = E\cosh((x - x_0)/E)$. Si discuta l'esistenza della soluzione in dipendenza dei parametri del problema (le posizioni dei due punti rispetto all'asse). Si troverà che non sempre il problema ammette soluzione (*il che si può mettere in evidenza sperimentalmente con filo di ferro e acqua saponata*).*

PROBLEMA 1.3-8 []Determinare la forma che assume, sotto l'azione della gravità, un cavo flessibile e inestendibile avente spessore e densità uniformi, appeso alle due estremità.

SOLUZIONE *[]Il problema è simile al precedente, ma la condizione di lunghezza fissata pone un vincolo alla soluzione. Si tratta di minimizzare l'energia potenziale del cavo espressa dal funzionale*

$$U[y] = mg\rho \int y(x)\sqrt{1 + y'(x)^2}\, dx$$

sotto la condizione che la lunghezza

$$l[y] = \int \sqrt{1 + y'(x)^2}\, dx$$

sia fissata. Il metodo da applicare è quello dei **moltiplicatori di Lagrange**. *Si cerca di minimizzare il funzionale* $U[y] - \lambda l[y]$ *e si determina a posteriori il parametro* λ *in modo da soddisfare il vincolo. L'integrale primo risulta in questo caso* $(mg\rho y - \lambda)/\sqrt{1 + y'(x)^2}$, *identico, a parte una traslazione della* y, *a quello del problema precedente. La soluzione sarà dunque ancora una catenaria. Si discuta anche in questo caso l'esistenza di una soluzione che rispetti i vincoli.*

Si sarà osservato che non si è affrontato il problema di determinare il carattere della soluzione estremale: decidere se una soluzione delle equazioni alle variazioni costituisca un minimo o un massimo o un punto di semplice stazionarietà può essere cruciale per problemi di ottimizzazione. Questa problematica (il calcolo delle variazioni) ha radici antiche (Eulero, Bernoulli, Jacobi) e se ne può trovare un'esposizione in alcune monografie [**For60, Gou64, Lan66**]. Per i nostri scopi c'è da osservare questo: nelle applicazioni alla meccanica che consideriamo in questo libro non è rilevante determinare il carattere della soluzione; in secondo luogo qualunque problema reale di ottimizzazione soggetto a vincoli costituisce un problema in genere non affrontabile per via analitica, mentre esistono potenti strumenti di analisi numerica per determinare una soluzione (vedi ad es. [**PFTV86**]).

1.3.2. Principio di Maupertuis. Esistono varianti interessanti al principio di Lagrange (si vedano, per maggiori dettagli [**Gol50, Lan66**] e per una visione storica [**Mac77**]). Ne illustriamo in particolare uno che presenta interessanti analogie con l'ottica. Supponiamo di considerare, per una data soluzione dell'equazione del moto[1] $q_{cl}(t)$, una qualunque traiettoria virtuale $q(t)$ che soddisfi la stessa condizione iniziale $q(t_1) = q_{cl}(t_1) \equiv q_1$, sia vincolata a passare per il punto $q_2 \equiv q_{cl}(t_2)$ e in più rispetti la conservazione dell'energia. Si noti che a energia fissata il tempo di percorrenza diviene una variabile dipendente calcolabile come

$$\tau[q] = \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{q_1}^{q_2} \frac{ds}{\sqrt{E - V(q)}}$$

dove ds è l'elemento di lunghezza definito nelle coordinate q attraverso la matrice metrica:

$$ds^2 = g_{ij}(q)\, dq^i dq^j$$

[1] Il suffisso cl sta per "classica" e indica ordinariamente in meccanica quantistica nella formulazione di Feynman una traiettoria che sia soluzione delle equazioni classiche del moto.

Pertanto, per un qualunque cammino virtuale a energia fissata il tempo di arrivo in q_2 sarà in generale differente da t_2. Si avrà allora

$$S[q] - S[q_{cl}] = \int_{t_1}^{t_2} (L(q,\dot{q}) - L(q_{cl},\dot{q}_{cl}))\, dt + \int_{t_2}^{\tau[q]} L(q,\dot{q})\, dt$$
$$\simeq \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q_{cl}} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{cl}} \right) \delta q(t)\, dt + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{cl}} \delta q\, |_{t=t_2} + L(q_{cl}(t_2), \dot{q}_{cl}(t_2))\delta t\,,$$

dove $\delta t = \tau[q] - t_2$; ma $\delta q(t_2) = q(t_2) - q_{cl}(t_2) = q(t_2) - q(t_2 + \delta t) \simeq -\dot{q}(t_2)\delta t$ e perciò

$$\delta S[q] = \delta t \left(L - \dot{q}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = -E\delta t$$

dove abbiamo indicato con E l'energia della traiettoria $q_{cl}(t)$. Notiamo che allora che il funzionale

$$W[q, E] = S[q] + E\tau[q]$$

che viene anche chiamato l'*azione ridotta*, risulta stazionario sulle soluzioni delle equazioni del moto rispetto a variazioni che rispettino la conservazione dell'energia[2]. Il principio variazionale assume ora la forma (detta *di Maupertuis*)

$$\delta(S + E\tau) = \delta \int (L + E)\, dt = \delta \int 2T\, dt = 0$$

essendo T l'energia cinetica. Se a questo punto scegliamo l'*ascissa curvilinea*

$$s = \int \sqrt{g_{ij}(q) dq^i dq^j}$$

come parametro lungo la traiettoria, il principio di Maupertuis assume la forma

$$0 = \delta \int T(q(t))\, dt = \delta \int \sqrt{T(q)}\, ds$$

ovvero

$$\boxed{\delta \int \sqrt{E - V(q)}\, ds = 0}$$

Notiamo che in questa forma il principio variazionale permette di studiare direttamente le traiettorie indipendentemente dalla loro percorrenza oraria. In questa formulazione, le equazioni del moto sono assimilate a quelle di un moto di particella libera che avviene lungo le *geodetiche*, cioè le curve di minima distanza, per una geometria che non è quella fissata dalla configurazione del sistema (la g_{ij}), bensì quella definita dalla distanza elementare $\sqrt{E - V}ds$. Si noterà l'analogia con l'ottica geometrica: per un

[2] Il passaggio da S a W è un caso particolare di *trasformata di Legendre* (si veda il §2.1) ed infatti le relazioni $\partial S/\partial\tau = -E$, $\partial W/\partial E = \tau$ sono previste dallo schema generale; le incontreremo di nuovo nello schema di Hamilton-Jacobi.

mezzo trasparente con indice di rifrazione $n(\omega)$ dipendente dalla frequenza i raggi luminosi descrivono le traiettorie di *cammino ottico* minimo (o meglio stazionario), secondo il principio di Fermat

$$\delta \int n(\omega)\, ds = 0 \,.$$

Questa analogia era ben nota ad Hamilton e costituirà la base formale per la costruzione della meccanica ondulatoria (per una trattazione dettagliata dell'ottica dal punto di vista fisico-matematico si vedano [**Pau64, Per60, Tor53**]).

PROBLEMA 1.3-9 []Una particella si muove senza attrito su di una superficie caratterizzata dalle equazioni parametriche

$$x = \phi_1(u,v),\ y = \phi_2(u,v),\ z = \phi_3(u,v).$$

Scrivere la Lagrangiana del sistema. Come si può caratterizzare il moto dal punto di vista geometrico nel caso di totale assenza di forze esterne?

SOLUZIONE *[]In assenza di forze ($V(x) = \text{costante}$) la dinamica è interamente dettata dalla geometria: le traiettorie sono le* geodetiche *nello spazio delle configurazioni, che sono individuate indifferentemente dai due principi variazionali, di Lagrange o di Maupertuis:*

$$\delta \int_{t1}^{t2} g_{ij}\dot{q}^i\dot{q}^j\, dt = 0\,, \qquad \delta \int_{P_1}^{P_2} \sqrt{g_{ij}\, dq^i\, dq^j} = 0\,.$$

Si tratta dunque di studiare la geometria indotta sulla superficie da quella euclidea dello spazio $\mathbb{R}^3$, partendo dalla identificazione della metrica ds^2 che si ottiene esprimendo $dx_i\, dx^i$ in termini dei parametri (u,v). Un caso del tutto elementare è costituito dalle superfici sviluppabili; in tal caso la geometria è quella euclidea del piano e le traiettorie sono rette sulla superficie sviluppata (si descrive così ad esempio il moto libero sulla superficie di un cono).

PROBLEMA 1.3-10 []Consideriamo una massa puntiforme che si muove su di un piano senza attrito. L'energia potenziale assume due valori, rispettivamente V_1 e V_2, nei due semipiani $x < 0$ e $x > 0$. Facendo uso del principio di Maupertuis, determinare la generica traiettoria della particella e dimostrare che soddisfa a una "legge di rifrazione" identica a quella dell'ottica geometrica, a patto di mettere in relazione opportunamente l'indice di rifrazione con l'energia cinetica della particella.

PROBLEMA 1.3-11 [] Dimostrare l'equazione di Newton a partire dal principio di Maupertuis.

SOLUZIONE *[]Dalla definizione* $ds = \sqrt{dx_i dx^i}$ *si ha*

$$\begin{aligned}\delta \int \sqrt{E - V(x)}\, ds &= \int \sqrt{E - V(x)}\delta\, ds - \tfrac{1}{2}\int \frac{\delta V(x)}{\sqrt{E - V(x)}}\, ds \\ &= \int \sqrt{E - V(x)}\frac{dx^i}{ds}\, d\delta x^i - \tfrac{1}{2}\int \frac{\partial V}{\partial x^i}\frac{\delta x^i\, ds}{\sqrt{E - V(x)}}\end{aligned}$$

Ponendo $ds = \sqrt{2/m}\sqrt{E - V(x)}\, dt$ *ed uguagliando a zero la variazione per* δx^i *arbitrario, si ottiene l'equazione del moto.*

PROBLEMA 1.3-12 [] Si ricavi l'equazione esplicita delle curve geodetiche su una superficie di matrice metrica g_{ij} assegnata.

SOLUZIONE *[]Utilizziamo il principio di Maupertuis ed esprimiamo le coordinate* q *come funzioni della ascissa curvilinea* s*:*

$$\begin{aligned}\delta \int \sqrt{g_{ij}(q)\, dq^i dq^j} &= \int \left(g_{ij}\frac{dq^i}{ds}\delta\frac{dq^j}{ds}\, ds + \tfrac{1}{2}\frac{\partial g_{ij}}{\partial q^k}\delta q^k \frac{dq^i}{ds}\frac{dq^j}{ds}\, ds \right) \\ &= \int \left(-\frac{d}{ds}(g_{ij}\dot{q}^i)\, \delta q^j + \tfrac{1}{2} g_{ij,k}\dot{q}^i\dot{q}^j\delta q^k \right) ds \\ &= \int \left(-g_{ij}\ddot{q}^i - g_{ij,k}\dot{q}^i\dot{q}^k + \tfrac{1}{2} g_{ik,j}\dot{q}^i\dot{q}^k \right) \delta q^j\, ds = 0\end{aligned}$$

dove per semplicità si è indicato con $g_{ij,k}$ *la derivata parziale* $\partial g_{ij}/\partial q^k$*. L'equazione si può allora riscrivere nel modo più simmetrico*

$$g_{ij}\ddot{q}^j + \tfrac{1}{2}\left(g_{ik,j} + g_{ij,k} - g_{jk,i} \right) \dot{q}^j\dot{q}^i = 0$$

Secondo la convenzione del calcolo tensoriale l'equazione delle geodetiche si riscrive allora in termini dei simboli di Christoffel

$$\Gamma_{ijk} \equiv \tfrac{1}{2}\left(g_{ik,j} + g_{jk,i} - g_{ij,k} \right), \quad \Gamma^k_{ij} = g^{kl}\Gamma_{ijl}$$

nella forma

$$\ddot{q}^i + \Gamma^i_{jk}\, \dot{q}^j\dot{q}^k = 0.$$

Per gli elementi di calcolo tensoriale si veda [**Pau58**].

CAPITOLO 2

Il formalismo hamiltoniano

La meccanica di Newton ha assunto, nella formulazione di Lagrange, una forma estremamente semplice: le traiettorie di qualunque sistema dinamico sono individuate come curve di stazionarietà di un funzionale, l'*azione* del sistema. Ciò comporta la massima libertà nella scelta delle coordinate con cui si desidera descrivere la configurazione del sistema, in particolare ciò permette di adattarne la scelta alle particolari simmetrie presenti nel problema. Un ulteriore passo avanti in questa direzione si ottiene con la formulazione di Hamilton, in cui si riescono a mettere in gioco, nella scelta delle coordinate, anche le velocità generalizzate. Lo schema è fondamentale per gli sviluppi della dinamica celeste e, limitatamente agli scopi di queste lezioni, costituisce il modello astratto che si ripeterà con poche modifiche nell'ambito della meccanica quantistica. Vale la pena ribadire che nel passaggio dalla meccanica di Newton a quella di Lagrange e infine di Hamilton la fisica di base è del tutto inalterata. Ciò non di meno la diversa impostazione formale del problema del moto fornisce al ricercatore nuovi punti di vista da cui sviluppare metodi di calcolo efficienti (ad esempio la teoria delle perturbazioni). Premettiamo una definizione generale di trasformata di Legendre che sta a fondamento matematico della transizione dalla meccanica lagrangiana a quella hamiltoniana.

2.1. Funzioni convesse e trasformata di Legendre

Data una funzione convessa $f(x)$ su un intervallo reale (a, b) si definisce la sua trasformata di Legendre $g = \mathfrak{L}[f]$ nel modo seguente [**Arn78**]:

$$g(y) = \sup_x (xy - f(x))$$

Per funzioni differenziabili si ha ovviamente[1]

$$g(y) = (xy - f(x))\big|_{f'(x)=y}$$
$$f(x) = (xy - g(y))\big|_{g'(y)=x}$$

[1] Il simbolo $\sup_x$ indica l'*estremo superiore* dell'insieme di valori tra parentesi; la definizione non richiede a priori la differenziabilità (si veda il problema 2.1-2).

La seconda relazione, di facile verifica, significa che la trasformazione di Legendre $g = \mathfrak{L}[f]$ è *idempotente*, ossia $\mathfrak{L}[g] = f$. La trasformata è impiegata in quei casi in cui si intende usare la variabile y come variabile indipendente al posto di x, essendo $y = f'(x)$. Dalla definizione discende la diseguaglianza (di Young)

$$xy \le f(x) + g(y) \tag{2.1}$$

valida se $g = \mathfrak{L}[f]$.

La trasformata di Legendre è applicata in termodinamica allorquando si sostituisce alla coppia di variabili indipendenti *volume ed entropia* (V, S) la coppia *volume e temperatura* (V, T) secondo le relazioni

$$dE = -p\,dV + T\,dS \to \; dF = -p\,dV - S\,dT$$

dove l'energia interna e l'energia libera sono legate dalla trasformata di Legendre $F(V, T) = -\mathfrak{L}[E(V, S)]$. E infatti il lettore sarà familiare con le relazioni

$$p = -\frac{\partial E(V,S)}{\partial V}, \qquad T = \frac{\partial E(V,S)}{\partial S}$$
$$p = -\frac{\partial F(V,T)}{\partial T}, \qquad S = -\frac{\partial F(V,T)}{\partial T}$$

In questo caso la trasformata di Legendre agisce sulla coppia di variabili (S, T), nel caso della meccanica vedremo invece coinvolta la coppia $(\dot{q}, p)$.

PROBLEMA 2.1-1 []Dimostrare la disuguaglianza

$$\frac{x^\alpha}{\alpha} + \frac{y^\beta}{\beta} \ge xy\,, \quad \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} = 1$$

PROBLEMA 2.1-2 [] Si determini la trasformata di Legendre delle seguenti funzioni:

$f_1(x) = |x|$

$f_2(x) = \sqrt{x^2 + 1} - 1$

$f_3(x) = \max(|x| - 1, 0)$

SOLUZIONE *[]*$\mathfrak{L}[f_1](y) = 0$, $\mathfrak{L}[f_2](y) = 1 - \sqrt{1 - y^2}$, $\mathfrak{L}[f_3](y) = |y|$ *per* $|y| < 1$, $\mathfrak{L}[f_i](y) = +\infty$ *altrove.*

2.2. Equazioni di Hamilton

Applichiamo la trasformata di Legendre alla funzione Lagrangiana $L(q, \dot{q})$ limitatamente alle variabili $\dot{q}_i$. Indicando con H la funzione trasformata si ha

$$H(q^1, \ldots, q^n, p_1, \ldots, p_n) = \sup_{\dot{q}} \left(\sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}^i - L \right) .$$

Dato che la Lagrangiana è differenziabile la condizione di sup è verificata per $p_i = \partial L/\partial \dot{q}^i$. La variabile p_i è denominata il *momento coniugato* della variabile lagrangiana q^i e $H(q,p)$ è detta la funzione Hamiltoniana (o semplicemente l'**Hamiltoniana**) del sistema meccanico. Affinché sia possibile adottare i momenti coniugati per descrivere il moto del sistema è necessario che la relazione tra p e $\dot{q}$ sia invertibile, e cioè il determinante Jacobiano

$$\det \left\| \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j} \right\|$$

deve essere diverso da zero nella regione che interessa descrivere. Nel caso in cui il determinante sia identicamente nullo, come avverrebbe per una Lagrangiana lineare nelle velocità, la Lagrangiana viene detta *singolare*.

PROBLEMA 2.2-3 [] Determinare la funzione Hamiltoniana corrispondente alla Lagrangiana data da

$$\text{a)} \quad L = \tfrac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x)$$

$$\text{b)} \quad L = -mc^2 \sqrt{1 - \left(\frac{\dot{x}}{c}\right)^2}$$

(quest'ultima rappresenta la Lagrangiana per una particella libera secondo la Relatività ristretta).

SOLUZIONE *[]*

$$\text{a)} \quad H = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V(x)\,, \quad \text{b)} \quad H = c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2 c^2}\,.$$

PROBLEMA 2.2-4 []Determinare la funzione Hamiltoniana corrispondente alla Lagrangiana data da

$$L = -mc^2 \sqrt{g_{00} - \frac{1}{c^2}\, g_{ij} \dot{x}^i \dot{x}^j}\,,$$

e studiarne il limite per $c \to \infty$, ammettendo che $g_{00} = 1 + 2\phi(x)/c^2$ e $g_{ij} = \delta_{ij} + O(1/c^2)$. Che significato si può attribuire al campo $\phi(x)$?

Dalle proprietà generali della trasformazione di Legendre si ha dunque $\partial H/\partial p_i = \dot{q}^i$ e d'altra parte se valutiamo il differenziale totale dH otteniamo

$$\begin{aligned} dH(q,p) &= d\left(\sum p_i \dot{q}^i - L\right) \\ &= \sum (\dot{q}^i\, dp_i + p_i\, d\dot{q}^i - \dot{p}_i\, dq^i - p_i\, d\dot{q}^i) \\ &= \sum (\dot{q}^i\, dp_i - \dot{p}_i\, dq^i) \end{aligned}$$

Si ottengono pertanto le equazioni del moto in una forma particolarmente simmetrica nelle coordinate (q, p)

$$\begin{aligned} \dot{q}^i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q^i} \end{aligned}$$

che vengono dette *equazioni canoniche di Hamilton*, mentre le (q, p) vengono dette variabili canoniche. La variazione nel tempo di una qualunque funzione $f(q, p)$ è data da una relazione molto semplice che troverà una generalizzazione alla meccanica quantistica:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f(q,p) &= \sum_i \left(\frac{\partial f(q,p)}{\partial q^i} \dot{q}^i + \frac{\partial f(q,p)}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) \\ &= \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q^i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q^i} \right) \\ &\equiv \{f, H\} \end{aligned}$$

Quest'ultima espressione è denominata **parentesi di Poisson** di f e H e per essa si è introdotto il simbolo convenzionale $\{\,,\}$ (si vedano i problemi di questo capitolo per una serie di proprietà notevoli). Come abbiamo già sottolineato, il contenuto fisico delle equazioni di Hamilton, come per le equazioni di Lagrange, non è superiore a quello delle equazioni di Newton da cui siamo partiti. Tuttavia le differenti formulazioni delle leggi del moto permettono di individuare proprietà fisiche delle soluzioni che sarebbe alquanto arduo evidenziare nella formulazione originale. La virtù principale delle equazioni di Hamilton è quella di ammettere un gruppo di trasformazioni di coordinate molto più vasto di quello che abbiamo considerato nel caso lagrangiano. Per sviluppare questo aspetto fondamentale della dinamica Hamiltoniana fissiamo la necessaria terminologia. Si definisce *spazio delle configurazioni* la varietà[2] dei punti individuati dalle coordinate q. Si dice inoltre *spazio delle fasi* la varietà i cui punti sono parametrizzati dalle variabili (q, p). In generale un solo sistema di coordinate non è sufficiente: così come si usa un *atlante* di carte locali per descrivere adeguatamente la superficie terrestre, così può risultare necessario introdurre più *carte locali* opportunamente coordinate tra loro per descrivere adeguatamente il moto di un sistema meccanico complesso. Assegnato un punto nello spazio delle fasi, esiste una ed una sola soluzione delle equazioni del moto che passa per quel punto ad un tempo prefissato;

[2]Non assumeremo conoscenze specifiche di geometria differenziale, ma talvolta ne faremo uso implicitamente.

le equazioni di Hamilton sono infatti del primo ordine e quanto affermato segue dal teorema fondamentale delle equazioni differenziali. Il fatto che per ogni punto iniziale nello spazio delle fasi si ha una unica traiettoria rende possibile raffigurarsi il complesso di tutte le traiettorie come il moto di un fluido: ad ogni punto iniziale assegniamo una particella del fluido e possiamo seguire il moto di una particolare porzione del fluido inizialmente racchiuso in una regione S. Un primo risultato interessante che discende dalle equazioni di Hamilton è il seguente **teorema di Liouville**: *il volume di* S *è indipendente dal tempo.* La dimostrazione non è difficile: il volume è dato da

$$\mathcal{V}(t) = \int\limits_{(q,p)\in S(t)} dq\, dp = \int\limits_{(q,p)\in S(0)} dq\, dp\, J\left(\frac{\partial(q(t),p(t))}{\partial(q(0),p(0))}\right),$$

dove $S(t)$ è la regione individuata da tutti i punti dello spazio delle fasi ottenuti risolvendo le equazioni di Hamilton fino al tempo t con la condizione iniziale $(q(0),p(0)) \in S$. Si tratta perciò di valutare il determinante Jacobiano

$$J = \det\begin{pmatrix} \dfrac{\partial q^i(t)}{\partial q^j(0)} & \dfrac{\partial q^i(t)}{\partial p_j(0)} \\ \dfrac{\partial p_i(t)}{\partial q^j(0)} & \dfrac{\partial p_i(t)}{\partial p_j(0)} \end{pmatrix}$$

e dimostrare che $J \equiv 1$. A questo scopo è sufficiente studiare un intervallo di tempo infinitesimale: si ha in tal caso

$$\begin{aligned} J &= \det\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial q^j}\left(q^i + dt\dfrac{\partial H}{\partial p_i}\right) & \dfrac{\partial}{\partial p_j}\left(q^i + dt\dfrac{\partial H}{\partial p_i}\right) \\ \dfrac{\partial}{\partial q^j}\left(p_j - dt\dfrac{\partial H}{\partial q^i}\right) & \dfrac{\partial}{\partial p_j}\left(p_j - dt\dfrac{\partial H}{\partial q^i}\right) \end{pmatrix} \\ &= \det\begin{pmatrix} \delta_{ij} + dt\dfrac{\partial^2 H}{\partial q^j \partial p_i} & dt\dfrac{\partial^2 H}{\partial p_j \partial p_i} \\ -dt\dfrac{\partial^2 H}{\partial q^i \partial q^j} & \delta_{ij} - dt\dfrac{\partial^2 H}{\partial q^i \partial p_j} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Si ha in generale

$$\det(1 + \varepsilon X) = 1 + \varepsilon \operatorname{Tr} X + O(\varepsilon^2)$$

e nel caso di $J(dt)$ la traccia si annulla e quindi $dJ(t)/dt = 0$ per $t = 0$. Ma l'argomento si può ripetere per ogni altro istante successivo e quindi J è indipendente dal tempo e pertanto vale $J(t) = J(0) = 1$. La dinamica di Hamilton si può assimilare pertanto al moto di un fluido incomprimibile.

PROBLEMA 2.2-5 []Si consideri il moto di un punto materiale libero ($H = \frac{1}{2}p^2$) inizialmente in $q = 0$ con velocità p_0. Posizione e velocità sono noti con precisione rispettivamente Δq e Δp. Qual è la precisione con cui si può prevedere la posizione al tempo t? Studiare l'evoluzione della regione dello spazio delle fasi definita da $|q| < \Delta q, |p - p_0| < \Delta p$ e verificare la validità del teorema di Liouville.

PROBLEMA 2.2-6 []Sia $\langle f(q,p)\rangle$ il valore medio di f sulla soluzione delle equazioni del moto, ossia

$$\langle f(q,p)\rangle \equiv \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}\int_0^T dt\, f(q(t),p(t))\,.$$

La definizione ha senso per moti limitati, come ad esempio le orbite ellittiche del problema di Keplero. Dimostrare che vale in generale la relazione

$$\left\langle \sum_i q^i \frac{\partial H}{\partial q^i}\right\rangle = \left\langle \sum_i p_i \frac{\partial H}{\partial p_i}\right\rangle, \tag{2.2}$$

che si riduce, per $H = p^2/2m + V(q)$ alla

$$\left\langle q\, V'(q)\right\rangle = 2\left\langle p^2/2m\right\rangle\,.$$

Dedurne il risultato secondo cui nel moto di Keplero l'energia cinetica media $\langle T\rangle$ soddisfa $\langle T\rangle = -\frac{1}{2}\langle V\rangle = -E$.

SOLUZIONE *[]Si consideri il valor medio di* $(d/dt)\sum_i q^i p_i$ *. Il risultato discende dal fatto che, nell'ipotesi che il moto sia limitato, il valor medio di una derivata totale deve annullarsi. La relazione è nota come* **teorema del viriale**

2.3. Trasformazioni canoniche

La questione che affrontiamo ora è la seguente: quali sono le trasformazioni di coordinate $(q,p) \to (q',p')$ che lasciano inalterata la forma delle equazioni di Hamilton? È facile constatare che il gruppo di tali trasformazioni (detto gruppo delle *trasformazioni canoniche*) contiene come sottogruppo quello già considerato per le equazioni di Lagrange: se la trasformazione si esprime con $q^i \to q'^i = f^i(q)$ si avrà

$$L(q,\dot q) \equiv L'(q',\dot q') \equiv L'\left(f^i(q), \frac{\partial f^i}{\partial q^j}\dot q^j\right)$$

e perciò

$$p_i = \frac{\partial}{\partial \dot q^i} L'\left(f^i(q), \frac{\partial f^i}{\partial q^j}\dot q^j\right) = p'_j\,\frac{\partial f^i(q)}{\partial q^j} \tag{2.3}$$

La trasformazione è dunque lineare per quanto riguarda i momenti coniugati e si esprime nel modo più succinto con la condizione

$$p_i\, dq^i = p'_i\, dq'^i$$

equivalente alla (2.3). Questo tipo di trasformazioni è però una semplice estensione allo spazio delle fasi delle trasformazioni definite sullo spazio *base* delle configurazioni. Trasformazioni più generali del tipo $q \to f(q,p)$, $p \to g(q,p)$ costituiscono invece la vera novità del formalismo Hamiltoniano. La caratterizzazione delle trasformazioni canoniche è sorprendentemente semplice: in sostituzione della Eq. (2.3) si deve avere

$$p_i\, dq^i = p'_i\, dq'^i + dF(q,q') \tag{2.4}$$

dove $F(q,q')$ è detta la **funzione generatrice** (f.g) della trasformazione canonica. La trasformazione si rende esplicita sviluppando il differenziale; si ottiene così :

$$p_i = \frac{\partial F}{\partial q^i},\ p'_i = -\frac{\partial F}{\partial q'^i}$$

La chiave per comprendere questo risultato è da ricercare ancora nel principio variazionale. Una volta riespresso in termini di coordinate canoniche, il principio di Eulero-Lagrange diviene

$$\delta S \equiv \delta \int_{t_1}^{t_2} L\, dt \equiv \delta \int_{t_1}^{t_2} \Big(p\dot{q} - H(q,p)\Big)\, dt$$

dove ora dobbiamo ammettere variazioni indipendenti di $q(t)$ e $p(t)$. Sotto una variazione di $q(t)$ si ha

$$\delta S = \int \left(p\,\delta\dot{q} - \frac{\partial H}{\partial q}\,\delta q\right) dt = \int \left(-\dot{p} - \frac{\partial H}{\partial q}\right) \delta q(t)\, dt \Longrightarrow \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

mentre sotto una variazione di $p(t)$

$$\delta S = \int \left(\delta p\,\dot{q} - \frac{\partial H}{\partial p}\,\delta p\right) dt = \int \left(\dot{q} - \frac{\partial H}{\partial p}\right) \delta p(t)\, dt \Longrightarrow \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$$

Ora, sotto una generica trasformazione $q = f(q',p')$ si generano termini proporzionali a $\dot{p}$ nell'espressione dell'azione che cambiano la forma delle equazioni del moto, a meno che non sia possibile, integrando per parti, eliminare questi termini indesiderati. Ciò è ovviamente possibile se si può esprimere la forma differenziale $\sum_i p_i dq^i$ come $\sum p'_i\, dq'^i + dF$, in quanto il differenziale esatto contribuisce all'azione solo con termini al contorno che non entrano nelle variazioni. Le trasformazioni considerate in precedenza (pure trasformazioni di coordinate che non coinvolgono i momenti) costituiscono un caso particolare ovvero, in termini matematici, un *sottogruppo*, del gruppo delle trasformazioni canoniche, caratterizzato da $F(q,q') \equiv 0$.

Abbiamo caratterizzato le trasformazioni canoniche attraverso la proprietà di lasciare invarianti in forma le equazioni di Hamilton; d'altra parte le stesse equazioni sono del tipo $\dot{f} = \{f, H\}$. Per consistenza anche le Parentesi di Poisson (P.d.P.) devono essere in tutta generalità invarianti per trasformazioni canoniche (vedi Probl. 2.3-8). In particolare le P.d.P. fondamentali

$$\left\{q^i, q^j\right\} = \left\{p_i, p_j\right\} = 0 \tag{2.5}$$

$$\left\{q^i, p_j\right\} = \delta_{ij} \tag{2.6}$$

sono soddisfatte da qualunque insieme di variabili canoniche.

2.3.1. Trasformazioni canoniche infinitesimali. La forma costituita dall'Eq. (2.4) non è l'unica possibile e neppure la più conveniente. Ad esempio la trasformazione *identità* $\{p' = p, q' = q\}$ non è esprimibile in questa forma! La trasformata di Legendre ci suggerisce qualche variante. A partire dalla Eq. (2.4), possiamo decidere di passare ad una formulazione in cui siano (q, p') le variabili indipendenti:

$$G(q, p') = \sum_i q'^i p'_i + F(q, q')\Big|_{p'_i = -\partial F/\partial q'^i} \tag{2.7}$$

$$q'^i = \frac{\partial G}{\partial p'_i}\,,\ p_i = \frac{\partial G}{\partial q^i} \tag{2.8}$$

A questo punto è possibile rappresentare la trasformazione identità attraverso la f.g. $G(q, p') = \sum q^i p'_i$; ciò è più importante di quanto possa sembrare a prima vista: segue infatti che una trasformazione canonica che differisca di poco dall'identità sarà rappresentabile nella forma

$$G(q, p') = \sum_i q^i p'_i + \varepsilon g(q, p')$$

avendo indicato con ε un parametro che si possa considerare piccolo in qualche scala di riferimento. Si parla in questo caso di "trasformazioni canoniche infinitesime". Nel limite $\varepsilon \to 0$ si può esplicitare la trasformazione come segue:

$$\begin{aligned} q'^i &= \frac{\partial G}{\partial p'_i} = q^i + \varepsilon\,\frac{\partial g(q, p')}{\partial p'_i} = q^i + \varepsilon\,\frac{\partial g(q, p)}{\partial p_i} + O(\varepsilon^2) \\ p_i &= \frac{\partial G}{\partial q^i} = p'_i + \varepsilon\,\frac{\partial g(q, p')}{\partial q^i} = p'_i + \varepsilon\,\frac{\partial g(q, p)}{\partial q^i} + O(\varepsilon^2)\,. \end{aligned}$$

Si ha perciò che una trasformazione canonica infinitesimale è caratterizzata da una funzione generatrice $g(q,p)$ attraverso le relazioni

$$\delta q^i = q'^i - q^i = \varepsilon \frac{\partial g(q,p)}{\partial p_i} + O(\varepsilon^2)$$
$$\delta p_i = p'_i - p_i = -\varepsilon \frac{\partial g(q,p)}{\partial q^i} + O(\varepsilon^2)$$

e in generale

$$\delta f(q,p) = \frac{\partial f}{\partial q^i}\delta q^i + \frac{\partial f}{\partial p_i}\delta p_i = \varepsilon\{f,g\}.$$

Osservazione *[]Se identifichiamo la f.g.* $g(q,p)$ *con la funzione Hamiltoniana* $H(q,p)$ *e il parametro* ε *con un intervallo infinitesimo di tempo, possiamo concludere che l'evoluzione temporale del sistema Hamiltoniano, così come segue dalle equazioni di Hamilton,*

$$q(t+\ dt) = q(t) +\ dt\frac{\partial H}{\partial p}$$
$$p(t+\ dt) = p(t) -\ dt\frac{\partial H}{\partial q}$$

costituisce una trasformazione canonica infinitesimale *generata dalla Hamiltoniana. D'altra parte è altrettanto chiaro che due trasformazioni canoniche eseguite in successione sono equivalenti ad una singola trasformazione canonica, detta il prodotto delle prime due. Le trasformazioni canoniche costituiscono cioè un* gruppo. *L'evoluzione temporale si può perciò sempre pensare come l'effetto di infinite trasformazioni canoniche infinitesimali e costituisce perciò un gruppo di trasformazioni canoniche.*

2.3.2. Trasformazioni canoniche dipendenti dal tempo. Se ammettiamo che la trasformazione $(q,p) \to (q',p')$ coinvolga esplicitamente il tempo, le formule di trasformazione devono essere leggermente modificate; l'effetto più rilevante è costituito dal fatto che la Hamiltoniana riceve un contributo additivo proporzionale alla derivata rispetto al tempo della funzione generatrice . Ciò si ricava facilmente dal principio variazionale, tenendo conto che il termine $H(q,p)\ dt$ entra in gioco nella trasformazione. Dall'equazione

$$p_i\ dq^i - H(q,p)\ dt = p'_i\ dq'^i - K(q',p')\ dt +\ dG(q,p',t)$$

si ricavano, oltre alle equazioni già note (2.7), la seguente

$$H(q,p) = K(q',p') - \frac{\partial G}{\partial t}\ .$$

2.3.3. L'equazione di Hamilton-Jacobi. Immaginiamo ora di saper determinare una f.g. $G(q, p', t)$ tale che la nuova Hamiltoniana risulti identicamente nulla: $K = 0$. Le corrispondenti variabili canoniche (q', p') soddisfano a equazioni del moto del tutto banali $\dot{q}' = \dot{p}' = 0$, ossia esse *sono tutte costanti del moto*. In effetti possiamo organizzare la trasformazione in modo che $q'^i = q^i(0)$, $p'_i = p_i(0)$ e la trasformazione canonica prende la forma

$$p_i = \frac{\partial G}{\partial q^i}$$
$$q'^i = \frac{\partial G}{\partial p'_i}$$
$$K(q', p') = 0 = H(p, q) + \frac{\partial G}{\partial t} \ .$$

Si procede come segue: indicando con $(q'^i, p'_i) = (\alpha^i, \beta_i)$ i valori costanti delle nuove variabili canoniche, si avrà

$$H\left(\frac{\partial G(q, \beta, t)}{\partial q^i}, q^i\right) + \frac{\partial G(q, \beta, t)}{\partial t} = 0$$

Una volta determinata una soluzione particolare dell'equazione che contenga n costanti indipendenti da identificare con le variabili β, la trasformazione canonica è completata dalla

$$\alpha^i = \frac{\partial G(q, \beta, t)}{\partial \beta_i}$$

Questo schema, noto come *equazione di Hamilton-Jacobi*, costituisce un vero e proprio metodo di soluzione delle equazioni del moto, in cui si è sostituita una singola equazione differenziale alle derivate parziali in luogo delle $2n$ equazioni differenziali ordinarie del primo ordine (nella forma di Hamilton). Nell'affrontare la soluzione di un problema concreto questo schema sarà efficace se, ad esempio, risulterà possibile adottare la *separazione delle variabili*, come vedremo più avanti; oppure potrà prestarsi ad impostare qualche calcolo approssimato a partire dalla soluzione nota di un sistema facilmente integrabile. In generale invece, ove si debba ricorrere al metodo numerico come unica risorsa di calcolo, è molto più vantaggioso impostare il problema in termini di equazioni del moto ordinarie.

Il problema inverso, costruire cioè la soluzione $G(q, \beta, t)$ nota la soluzione $q^i(t)$ delle equazioni del moto, si risolve ricorrendo al principio variazionale. Si ha infatti (si veda il Probl. 2.3-11 a p. 30)

$$F(q, q_0, t) = \int_0^t L(q_{cl}(\tau), \dot{q}_{cl}(\tau))d\tau \tag{2.9}$$

dove abbiamo indicato con q_{cl} la soluzione nota delle equazioni del moto caratterizzata dalle condizioni $q_{cl}(0) = q_0, q_{cl}(t) = q$. Si trova quindi che la soluzione dell'equazione di Hamilton-Jacobi è data dal *valore estremale* del funzionale di azione, il valore cioè che esso assume sulla soluzione classica. Effettuando poi una trasformazione di Legendre si può ottenere la soluzione nella forma $G(q, p')$. Si noti che queste considerazioni valgono in generale solo per un intervallo limitato $t \in (0, T)$, nel quale esiste un'unica soluzione classica che soddisfi alle condizioni al contorno. Ciò non è *mai* vero per quei sistemi che in seguito alla imposizione di vincoli sono caratterizzati da uno spazio delle configurazioni non semplicemente connesso. In questo caso infatti, tutte le traiettorie virtuali con assegnati punto iniziale e finale si suddividono in *classi di omotopia* (due traiettorie appartengono alla stessa classe se sono deformabili con continuità l'una nell'altra). In ognuna delle classi di omotopia l'azione assume in generale un valore minimo che rappresenta perciò una soluzione classica (si veda a questo proposito il Probl. 2.3-12 a p. 30). Considerazioni di questo tipo, che tengono conto della geometria non banale dello spazio delle configurazioni, sono necessarie per affrontare problemi globali di dinamica; per i recenti progressi ottenuti in dinamica classica, che esulano dagli scopi di queste lezioni, si consultino ad es. [**AM79, Arn78, Gal83, Wei73**].

L'equazione di Hamilton-Jacobi stazionaria. Una variante allo schema precedente è ottenuta nel caso che la Hamiltoniana non dipenda esplicitamente dal tempo, come è il caso per un sistema isolato. Si potrà allora porre come *ansatz* $G(q, \beta, t) = W(q, \beta) - \beta_n t$ (che si può assimilare alla trasformazione già considerata al §1.3.2) il che porta alla equazione di Hamilton-Jacobi stazionaria

$$H\left(\frac{\partial W}{\partial q^i}, q^i\right) = \beta_n$$

In questo schema la trasformazione generata da W è indipendente dal tempo e l'Hamiltoniana coincide con la variabile canonica p'_n; le variabili (q'^i, p'_i) con $i < n$ sono costanti del moto e fissano la traiettoria come curva geometrica nello spazio delle fasi, mentre la percorrenza oraria del punto sulla traiettoria è fissata dall'ultima equazione

$$\alpha_n = \frac{\partial W}{\partial \beta_n} - t\,.$$

Illustriamo ora un metodo di soluzione dell'equazione di Hamilton-Jacobi, basato su un'idea che trova applicazioni alquanto generali[3]. Diremo che

[3] Per una trattazione estesa di tecniche di soluzione di equazioni alle derivate parziali del primo ordine si veda [**Gou59**].

l'equazione è *separabile* se esiste una soluzione della forma

$$W(q^1, \ldots, q^n) = f(q^1) + f(q^2) + \ldots + f(q^n)\,.$$

Si riconosce facilmente che l'equazione può risultare separabile in un sistema di coordinate canoniche ma non in altre. L'intuizione deve guidare perciò nella ricerca di un sistema di coordinate adatto. L'esempio più semplice è costituito dall'Hamiltoniana

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_1(x_1) + V_2(x_2) + V_3(x_3)\,,$$

che rappresenta una particella di massa m che si muove in tre dimensioni sotto l'influenza di un campo di forze di energia potenziale $\sum V_i(x_i)$. È chiaro che questo problema dinamico si risolve agevolmente direttamente dalle equazioni del moto, tuttavia ci serve per vedere all'opera il meccanismo di separazione delle variabili: poniamo $W = f(x_1) + f(x_2) + f(x_3)$, ne segue

$$\sum_{i=1}^{3}\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{df_i}{dx_i}\right)^2 + V(x_i)\right] = E\,.$$

Dal momento che le tre coordinate x_i sono indipendenti questa identità può essere soddisfatta solo se valgono *separatamente* le relazioni

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{df_i}{dx_i}\right)^2 + V(x_i) = E_i$$

con E_1, E_2, E_3 costanti opportune, la cui somma è E. Siamo allora in presenza di equazioni differenziali *ordinarie* che si risolvono immediatamente per quadrature:

$$f_i(x_i) = \int dx_i \sqrt{2m(E_i - V(x_i))}$$

ed infine

$$W(x_i, E_i) = \sum_{i=1}^{3} \int dx_i \sqrt{2m(E_i - V(x_i))}\,.$$

Le variabili Q_i coniugate alle E_i si ottengono secondo le formule che definiscono la trasformazione canonica $(x_i, p_i) \to (Q_i, E_i)$

$$Q_i = \frac{\partial W}{\partial E_i} = \sqrt{\frac{m}{2}} \int \frac{dx_i}{\sqrt{E_i - V_i(x_i)}}\,.$$

Dato che $H = E_1 + E_2 + E_3$, l'evoluzione temporale delle variabili Q è molto semplice

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H}{\partial E_i} = 1$$

ossia $Q = \partial W/\partial E = t$ come anticipato nel paragrafo 1.3.2. Gli esempi interessanti di separazione di variabili si hanno per sistemi esprimibili

semplicemente in coordinate curvilinee. Per il caso di coordinate polari (r, ϑ, φ) si ha

$$L = \frac{m}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\vartheta}^2 + r^2 \sin^2\vartheta\, \dot{\varphi}^2\right) - V(r, \vartheta, \varphi) \ .$$

Applicando la trasformata di Legendre si ottiene

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\vartheta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2 \sin^2\vartheta}\right) + V(r, \vartheta, \varphi) \ .$$

Si noti che la energia cinetica può essere scritta come $(p_r^2 + \ell^2/r^2)/(2m)$, essendo ℓ^2 il modulo quadrato del momento angolare $|\mathbf{r} \wedge \mathbf{p}|^2$. Se il potenziale è della forma speciale

$$V(r, \vartheta, \varphi) = V(r) + \frac{U(\vartheta)}{r^2} + \frac{Z(\varphi)}{r^2 \sin^2\vartheta}$$

l'equazione di Hamilton-Jacobi ammette soluzione di tipo separato nelle variabili. Si ha infatti, ponendo $W = \mathcal{R}(r) + \Theta(\vartheta) + \Phi(\varphi)$

$$\mathcal{R}'(r)^2 + \frac{1}{r^2}[\Theta'(\vartheta)^2 + 2mU(\vartheta)] + \frac{1}{r^2 \sin^2\vartheta}\left[\Phi'(\varphi)^2 + 2mZ(\varphi)\right] = 2mE \ .$$

Possiamo allora ridistribuire i termini fino ad ottenere

$$\begin{aligned} &r^2[\mathcal{R}'(r)^2 + 2mV(r) - E] = \\ &\qquad -[\Theta'(\vartheta)^2 + 2mU(\vartheta)] + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\left[\Phi'(\varphi)^2 + 2mZ(\varphi)\right] \ . \end{aligned} \tag{2.10}$$

Si nota ora che il membro di sinistra della precedente equazione dipende solo dalla variabile r, mentre quello di destra dipende dal resto delle coordinate. Essendo r, ϑ, φ variabili indipendenti, si deve concludere che entrambi i membri della Eq. (2.10) devono essere uguali ad una costante, identificabile con $-\ell^2$. Si ottiene allora

$$\mathcal{R}'(r)^2 + 2mV(r) + \ell^2/r^2 = 2mE$$

e analogamente per separazione delle variabili angolari

$$\begin{aligned} \Phi'(\varphi)^2 + 2mZ(\varphi) &= \mu^2 \\ \Theta'(\vartheta)^2 + 2mU(\vartheta) + \mu^2/\sin^2\vartheta &= \ell^2 \ . \end{aligned}$$

Il caso dei potenziali a simmetria sferica, detti *potenziali centrali*, è particolarmente semplice; si ha in questo caso

$$\begin{aligned} \Phi'(\varphi) &= \mu \\ \Theta'(\vartheta) &= \sqrt{\ell^2 - \mu^2/\sin^2\vartheta} \end{aligned}$$

da cui si ricava la soluzione per quadrature

$$\begin{aligned} W(r,\vartheta,\varphi;E,\ell,\mu) &= \mu\varphi + \int d\vartheta\sqrt{\ell^2-\mu^2/\sin^2\vartheta} \\ &+ \int dr\sqrt{2m(E-V(r))-\ell^2/r^2} \end{aligned}$$

Le variabili coniugate a (E,ℓ,μ) si ottengono completando la trasformazione canonica secondo l'Eq. (2.7):

$$Q_E = \frac{\partial W}{\partial E},\ Q_\ell = \frac{\partial W}{\partial \ell},\ Q_\mu = \frac{\partial W}{\partial \mu}\ .$$

Per la soluzione esplicita del moto in campo centrale è tuttavia conveniente restringersi fin dall'inizio al piano in cui avviene il movimento, il piano ortogonale al momento angolare che corrisponde a $\vartheta = \frac{1}{2}\pi$. La conservazione del momento angolare implica che il moto giace su questo piano e non c'è nessuna limitazione di generalità a discutere il problema del moto direttamente in due gradi di libertà[4]. Si ottiene in tal modo

$$\begin{aligned} W &= \ell\varphi + \int dr\sqrt{2m(E-V(r))-\ell^2/r^2} \\ Q_\ell = \frac{\partial W}{\partial \ell} &= \varphi - \ell\int \frac{dr}{r^2\sqrt{2m\,(E-V(r))-\ell^2/r^2}} \end{aligned} \tag{2.11}$$

La traiettoria è descritta dalla semplice equazione $Q_\ell(t) = Q_\ell(0)$, mentre la percorrenza oraria dell'orbita è data dalla equazione

$$Q_E = m\int \frac{dr}{\sqrt{2m\,(E-V(r))-\ell^2/r^2}} = t - t_0\ .$$

Per il moto piano in campo centrale $V(r)$ si ha perciò la soluzione generale (a meno di quadrature); la traiettoria è convenientemente espressa in termini della variabile reciproca $\rho = 1/r$:

$$\varphi - \varphi_0 = -\ell\int^{r^{-1}} d\rho\left(2m(E-V(\rho^{-1}))-\ell^2\rho^2\right)^{-1/2}\ .$$

In base alle particolari simmetrie del campo di forze può risultare conveniente introdurre altri sistemi di coordinate curvilinee. In genere i sistemi che permettono la separazione delle variabili nell'equazione di Hamilton-Jacobi sono basati su fasci di coniche o di quadriche confocali (si veda ad esempio [**MS61**]).

[4] Si noti che ciò non vale in meccanica quantistica (vedi il cap.6.5).

PROBLEMA 2.3-7 [] Verificare le seguenti proprietà delle parentesi di Poisson:

1. $\{f_1, f_2\} = -\{f_2, f_1\}$
2. $\{f_1 + f_2, f_3\} = \{f_1, f_3\} + \{f_2, f_3\}$
3. $\{c\, f_1, f_2\} = c\{f_1, f_2\}$
4. $\{f_1 f_2, f_3\} = f_1\{f_2, f_3\} + f_2\{f_1, f_3\}$
5. $\{\{f_1, f_2\}, f_3\} + \{\{f_2, f_3\}, f_1\} + \{\{f_3, f_1\}, f_2\} = 0.$

SOLUZIONE *[]Le prime quattro proprietà sono conseguenze immediate della definizione. La verifica dell'ultima (identità di Jacobi) è facilitata dalla considerazione seguente: il termine $\{\{f_1, f_2\}, f_3\}$ è un polinomio omogeneo nelle derivate parziali seconde di f_1, f_2. Nel calcolare gli altri due termini possiamo allora considerare le derivate prime di f_1 come costanti, e questo permette di eliminare la metà dei termini e raggiungere più rapidamente il risultato. Notiamo che l'identità assume una forma peculiare se introduciamo la notazione*

$$X_f(g) \equiv \{f, g\}\ .$$

X_f *è un* operatore *differenziale lineare; l'identità di Jacobi si può allora interpretare nel modo seguente*

$$X_{f_1} X_{f_2}(f_3) - X_{f_2} X_{f_1}(f_3) = X_{\{f_1, f_2\}}(f_3)\ .$$

L'espressione $X_{f_1} X_{f_2} - X_{f_2} X_{f_1} \equiv [X_{f_1}, X_{f_2}]$ *è detta il* commutatore *dei due operatori differenziali; l'identità di Jacobi afferma che il commutatore è a sua volta un operatore differenziale lineare associato alla parentesi di Poisson di* f_1, f_2. *Una struttura formalmente molto simile si incontrerà quando tratteremo gli operatori lineari che costituiscono gli oggetti fondamentali (osservabili) della meccanica quantistica.*

PROBLEMA 2.3-8 [] Dimostrare che le parentesi di Poisson sono invarianti sotto trasformazioni canoniche infinitesimali.

SOLUZIONE *[]Le P.d.P. sono invarianti per trasformazioni canoniche e in particolare sotto trasformazioni infinitesimali. Per verificarlo esplicitamente, si consideri una trasformazione canonica infinitesimale generata da* f*; si avrà:*

$$\begin{aligned}
\delta h(q,p) &= \varepsilon\{h, f\} \\
\delta g(q,p) &= \varepsilon\{g, f\} \\
\delta\{h, g\} &= \varepsilon\{\{h, g\}, f\} \\
&= -\varepsilon\left[\{\{f, h\}, g\} + \{\{g, f\}, h\}\right] \\
&= \left[\{\varepsilon\{h, f\}, g\} + \{h, \varepsilon\{g, f\}\}\right] \\
&= \{\delta h, g\} + \{h, \delta g\}
\end{aligned}$$

Si è fatto uso delle proprietà delle P.d.P., in particolare dell'identità di Jacobi. In sostanza si ha che posta $k = \{h, g\}$*, e indicata con* $\tilde{h}$ *la funzione* h *trasformata, si avrà* $\{\tilde{h}, \tilde{g}\} = \tilde{k}$.

PROBLEMA 2.3-9 [] Dimostrare che se f e g sono costanti del moto, lo è anche $\{f, g\}$. Conseguenza immediata dell'identità di Jacobi.

PROBLEMA 2.3-10 [] Calcolare la parentesi di Poisson tra le componenti del momento angolare $\mathbf{M} = \mathbf{q} \wedge \mathbf{p}$.

SOLUZIONE *[]$\{M_1, M_2\} = M_3$, e in generale $\{M_i, M_j\} = \varepsilon_{ijk} M_k$, dove ε_{ijk} è il simbolo di Ricci definito da*

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 0 & \textit{se due o più indici coincidono} \\ 1 & \textit{se } (ijk) \textit{ è una permutazione pari di } (123) \\ -1 & \textit{altrimenti} \end{cases}$$

PROBLEMA 2.3-11 [] Dimostrare che la funzione $F(q, q_0, t)$ data in (2.9) risolve l'equazione di Hamilton-Jacobi.

SOLUZIONE *[]Si consideri un incremento $\delta q(t)$ del punto estremo della traiettoria: si avrà che la nuova traiettoria su cui calcolare l'integrale è data da $q_{cl}(\tau) + \delta q(\tau)$ e quindi*

$$\delta F(q, q_0, t) = \int_0^t \left(\frac{\partial L}{\partial q_{cl}} \delta q(\tau) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{cl}} \delta \dot{q}(\tau) \right) d\tau$$

e per le equazioni del moto questo risulta uguale a $p(t)\delta q(t)$, ossia

$$\frac{\partial F(q, q_0, t)}{\partial q} = p$$

D'altra parte, per un incremento $t \to t + \delta t$ con $q(t)$ fissato,

$$\begin{aligned} \delta F(q, q_0, t) &= \int_0^t \left(\frac{\partial L}{\partial q_{cl}} \delta q(\tau) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{cl}} \delta \dot{q}(\tau) \right) d\tau + L(q(t), \dot{q}(t))\, \delta t \\ &= p_{cl} \delta q(t) + L\, \delta t \end{aligned}$$

Ma si deve avere $\delta q(t) = -\dot{q}_{cl}(t)\, dt$ e perciò

$$\delta F = (L - p_{cl}\, \dot{q}_{cl}(t))\, \delta t = -H(p_{cl}(t), q_{cl}(t))\, \delta t$$

e di conseguenza l'equazione di Hamilton-Jacobi è soddisfatta.

PROBLEMA 2.3-12 [] Si consideri un pendolo semplice di massa m e lunghezza l. Dimostrare che esistono infinite soluzioni classiche $\vartheta(t)$ che soddisfano alle condizioni al contorno $\vartheta(0) = \vartheta_0, \vartheta(t) = \vartheta_1$. Interpretare questo fatto in termini intuitivi.

PROBLEMA 2.3-13 []Considerare il moto in campo centrale $V(r) = -k/r$ (moto di Keplero). Dimostrare le tre leggi di Keplero: a) la velocità areolare è costante; b) le traiettorie chiuse sono ellissi con il sole in uno dei fuochi; c) il periodo dell'orbita T e l'asse dell'ellisse $2a$ soddisfano la relazione $T^2/a^3 = \mathtt{costante}$ (indipendente cioè dal pianeta). Si discutano i limiti di validità delle leggi di Keplero.

CAPITOLO 3

Applicazioni

3.1. Invarianti adiabatici

Consideriamo un sistema meccanico caratterizzato da alcuni parametri fisici variabili nel tempo. Un tipico esempio è dato da un pendolo semplice la cui lunghezza $l(t)$ varia nel tempo; un altro esempio è quello di una massa puntiforme che si muove all'interno di un volume con pareti perfettamente elastiche la cui distanza venga modificata a piacere nel tempo (un cilindro con un pistone mobile). Se la velocità di variazione nel tempo di questi parametri è percentualmente molto piccola sulla scala temporale tipica del sistema (ad esempio nel caso del pendolo $|\dot{l}(t)/l(t)| \ll \omega(t)$, essendo quest'ultima la frequenza di oscillazione), esistono grandezze fisiche la cui variazione nel tempo può essere resa piccola a piacere, in un senso che sarà precisato meglio in seguito. Queste grandezze vengono chiamate *invarianti adiabatici* e rivestono una notevole importanza nello sviluppo della meccanica quantistica (oltre che avere tutt'oggi un certo peso nella moderna dinamica non-lineare). Consideriamo l'esempio elementare seguente. Una massa puntiforme m rimbalza in modo perfettamente elastico tra due pareti la cui distanza aumenta nel tempo secondo la legge $l(t) = l_0 + \gamma t$. La velocità iniziale della particella v_0 è molto maggiore di γ. Se al tempo T si ha $l(T) = 2l(0) \equiv 2l_0$, e inoltre andiamo al limite per $T \to \infty$ ($\gamma \to 0$), è facile dimostrare che la velocità finale $v(T)$ tende al valore $v_0/2$. Ciò si può comprendere intuitivamente come effetto dell'assorbimento di energia da parte della parete. Il risultato precedente suggerisce che in sostituzione dell'integrale primo dell'energia sia presente un'altra grandezza conservata e cioè il prodotto $l(t)v(t)$; si dimostra infatti (cfr. Probl. 3.1-1) che questa grandezza è approssimativamente una costante del moto con tanto maggiore precisione quanto più lento è il moto della parete in confronto a $v(t)$. L'osservazione cruciale a questo punto è che se consideriamo le pareti fisse, il prodotto $2lv$ rappresenta *l'area della porzione dello spazio delle fasi racchiuso dalla traiettoria*. Viene spontaneo formulare la congettura che sia proprio questa area a mantenersi costante in generale per deformazioni lente dei parametri del sistema.

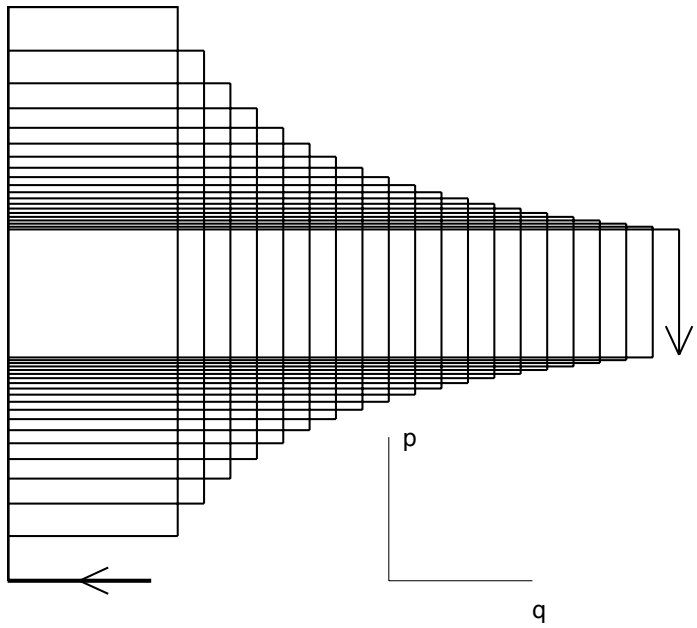


FIGURA 3-1. *La traiettoria nello spazio delle fasi per la particella che rimbalza elasticamente tra due pareti di cui una è in movimento.*

L'espressione generale dell'invariante adiabatico sarebbe dunque

$$J = \iint_{H(q,p)<E} dp\, dq = \oint p(q,E)dq \tag{3.1}$$

Nel caso di un pendolo a lunghezza $l(t)$ variabile nel tempo, l'equazione del moto per le piccole oscillazioni si ottiene dalla Lagrangiana

$$L = \tfrac{1}{2}m\, l(t)^2\dot{\vartheta}^2 - \tfrac{1}{2}mg\, l(t)\vartheta^2$$

L'area individuata dalla traiettoria nello spazio delle fasi (ϑ, p_ϑ) è in questo caso un'ellisse di semiassi $(\sqrt{2mE}l(t),\ \sqrt{2E/mgl(t)})$. Se la congettura riguardo all'area individuata dalla traiettoria è giusta, la quantità

$$J(t) = 2\pi E(t)\sqrt{l(t)}$$

si deve mantenere approssimativamente costante, ossia, come è facile vedere, l'ampiezza delle oscillazioni del pendolo deve dipendere da $l(t)$ secondo la relazione

$$\vartheta_{\max} \propto l(t)^{-3/4} \tag{3.2}$$

Tenendo conto delle relazioni $\omega \propto \sqrt{g/l(t)}$ per la frequenza e $E \propto l(t)\,\vartheta_{\max}^2$ per l'energia, l'ipotesi avanzata prima equivale a

$$E(t)/\omega(t) \sim \text{costante} \ .$$

Questa relazione è verificata anche nel caso della parete mobile di moto uniforme ma non costituisce un risultato valido in generale. Il teorema adiabatico, per il quale riferiamo al libro di Arnold [**Arn78**], afferma che sono proprio le quantità definite dall'Eq. (3.1), dette *variabili d'azione*, a costituire le grandezze *quasi* conservate, ossia gli *invarianti adiabatici*. Per sistemi a più gradi di libertà l'individuazione di questi invarianti non è sempre agevole. L'unico caso semplice è quello dei sistemi separabili, in cui è possibile definire relazioni del tipo

$$p_i = p_i(q^i, E, \beta_1, \ldots, \beta_{n-1})$$

in base alle quali si pone

$$J_i = \oint p_i \, dq^i$$

PROBLEMA 3.1-1 [] Dimostrare la relazione $v(t)l(t) \sim$ *costante* per una massa puntiforme che rimbalza in assenza di attrito tra pareti perfettamente elastiche che si allontanano con velocità γ molto inferiore a $v(t)$.

SOLUZIONE *[]Indichiamo con* $\ldots, t_{n-1}, t_n, t_{n+1}, \ldots$ *gli istanti a cui la particella urta la parete mobile. Sia* v_n *la velocità costante nell'intervallo* (t_n, t_{n+1})*; sia* $l_n = l(t_n) = l_0 + \gamma t_n$*; si ha ovviamente* $t_{n+1} - t_n = (l_{n+1} + l_n)/v_n$*. Dall'uniformità del moto della parete segue*

$$l_{n+1} - l_n = \gamma(t_{n+1} - t_n)$$

mentre dalle leggi dell'urto si ha

$$v_{n+1} = v_n - 2\gamma \ .$$

Segue allora

$$v_n(l_{n+1} - l_n) = \gamma(l_{n+1} + l_n)$$

ovvero

$$(v_{n+1} + \gamma)l_{n+1} = (v_n + \gamma)l_n$$

che rappresenta una legge di conservazione esatta. equivalente a

$$l_n v_n = l_0 v_0 - \gamma^2(t_n - t_0) \ .$$

Fintanto che $v(t) \gg \gamma$ *si può approssimare la legge di conservazione con* $v(t)l(t) \sim$ costante*. Il risultato si può anche riassumere con* $d(l(t)v(t))/dt = -\gamma^2$ *, che mostra come la derivata di* lv *sia un infinitesimo di ordine superiore rispetto a* $dl(t)/dt = \gamma$*.*

PROBLEMA 3.1-2 []Risolvere l'equazione del moto per le piccole oscillazioni di un pendolo con lunghezza $l(t) = l_0 \exp(\gamma t)$ e verificare l'Eq. (3.2).

PROBLEMA 3.1-3 []Considerare il moto di un punto materiale vincolato a scorrere senza attrito lungo un profilo piano chiuso Γ_t definito parametricamente dalle equazioni $x = X(s,t)$, $y = Y(s,t)$ essendo $s \in (0,1)$ un parametro lungo la curva e t il tempo. Scrivere la funzione Hamiltoniana e studiare le caratteristiche del moto nel caso di deformazione lenta del profilo Γ_t.

SOLUZIONE *[]Differenziando rispetto a* t *troviamo*

$$L = \tfrac{1}{2}(X_t^2 + Y_t^2)\dot{s}^2 + (X_t X_s + Y_t Y_s)\dot{s} + \tfrac{1}{2}(X_t^2 + Y_t^2)$$

avendo posto $m = 1$, $X_t \equiv \dfrac{\partial X}{\partial t}$ etc. *Conviene introdurre le grandezze ausiliarie*

$$G = X_s^2 + Y_s^2$$
$$A = X_s X_t + Y_s Y_t$$
$$V = \tfrac{1}{2}(X_t^2 + Y_t^2)$$

in termini delle quali il momento lineare è dato da

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{s}} = (X_t^2 + Y_t^2)\dot{s} + X_t X_s + Y_t Y_s \equiv G\dot{s} + A$$

e infine

$$H = \frac{(p - A)^2}{2G} - V$$

Se la dipendenza da t *è molto lenta, possiamo applicare l'approssimazione adiabatica secondo cui l'integrale d'azione* $J = \oint p\,dq$ *si mantiene costante nel tempo. Dato che sia* V *che* A *contengono derivate rispetto al tempo, troviamo in prima approssimazione*

$$J = \oint (\sqrt{2G(E+V)} + A)\,ds \sim \oint \sqrt{2GE}\,ds$$

e quindi $E(t) \sim (\oint \sqrt{G}\,ds)^{-2} = 1/L(t)^2$, *dove* $L(t)$ *è la lunghezza della curva.*

PROBLEMA 3.1-4 []Risolvere le equazioni del moto per un pendolo semplice di lunghezza $l(t) = l(0) + \gamma t$ nel limite di piccole oscillazioni.

SOLUZIONE *[]Per un pendolo semplice di lunghezza variabile* $l(t)$ *l'equazione del moto, come si deduce dalla Lagrangiana (valida per piccole oscillazioni)*

$$L = \tfrac{1}{2}ml^2\dot{\varphi}^2 - \tfrac{1}{2}mgl(t)\varphi^2$$

è la seguente

$$\ddot{\varphi} + 2\frac{\dot{l}}{l}\dot{\varphi} + \frac{g}{l}\varphi = 0$$

La derivata logaritmica di $l(t)$ *compare come un fattore di smorzamento (se positiva), il che fa prevedere che le oscillazioni tendano ad attenuarsi per* $l(t)$ *crescente. Assumendo per* $l(t)$ *la forma richiesta* $l(t) = l_0 + \gamma t$ *l'equazione si risolve agevolmente con il* metodo di Laplace *(vedi l'App. B.6). Posto*

$$\varphi(t) = \int_\Gamma e^{zt} F(z)\,dz$$

si trova infatti

$$F(z) = \exp\left\{\frac{l_0}{\gamma}z - \frac{g}{\gamma z}\right\}$$

mentre per Γ *si può scegliere un contorno chiuso intorno a* $z = 0$*. La soluzione è pertanto*

$$\varphi(t) \propto \oint \exp\left\{\frac{l(t)z}{\gamma} - \frac{g}{\gamma z}\right\} dz$$

che si può esprimere in termini di funzioni di Bessel. Il limite per $\gamma \to 0$ *si può stimare con il metodo del punto sella (vedi l'App. B.2):*

$$\frac{\partial}{\partial z}(lz - g/z) = 0 \to z = \pm i\sqrt{g/l}$$

da cui si ottiene

$$\varphi(t) \propto l(t)^{-3/4}\cos(2\sqrt{l(t)g}/\gamma).$$

Si verifica facilmente che l'invarianza adiabatica ($E(t) \propto \sqrt{l(t)/g}$*) fornisce lo stesso risultato per ampiezza di oscillazione*[1]*.*

3.1.1. Variabili d'azione. Sia dato un sistema separabile per il quale si sia valutata la funzione d'azione

$$W(q^1, \ldots, q^n; \beta_1, \ldots, \beta_n) = \sum_i \int p_i(q;\beta)\, dq^i.$$

Se il moto è limitato, le variabili q^i avranno ciascuna un intervallo di oscillazione $(q^i_{\min}, q^i_{\max})$ che rappresenta un *taglio* per la funzione analitica $p_i(q^i;\beta)$. Per continuazione analitica al piano complesso q^i si possono definire gli integrali

$$J_i = \frac{1}{2\pi}\oint p_i(q^i;\beta)\, dq^i \tag{3.3}$$

che rappresentano, per ciascun valore di i, l'incremento della funzione W sotto un ciclo completo della variabile q^i. Le quantità J_i vengono definite *variabili d'azione* del sistema Hamiltoniano. Le variabili J_i, sempreché risultino indipendenti, possono assumersi come nuove variabili canoniche in luogo delle β_i; ottenuta poi la funzione generatrice $W = W(q;J)$, si definiscono le variabili coniugate $w_i = \partial W/\partial J_i$. Queste ultime godono della notevole proprietà di subire un incremento fisso di 2π sotto ogni ciclo di oscillazione delle q^i (formalmente $\Delta_i W = 2\pi J_i \to \Delta_i \partial W/\partial J_j = \partial(\Delta_i W)/\partial J_j = 2\pi\delta_{ij}$). Le variabili w_i hanno perciò la natura geometrica di angoli, da cui segue la denominazione di *variabili d'azione-angolo* per il sistema di coordinate canoniche (J, w). Una trattazione minimamente rigorosa di questo argomento richiede l'uso del linguaggio della geometria

[1] E. A. Poe descrive un caso del genere in [**Poe45**]. Ovviamente il fatto che nel racconto sia la lunghezza del pendolo sia l'ampiezza delle oscillazioni fossero crescenti nel tempo dimostra che il moto era controllato dall'esterno (gli agenti dell'Inquisizione).

differenziale [**Arn78**]. Limitiamoci perciò ad un esempio concreto. Per il moto di Keplero separato in coordinate polari si ha (ℓ, m variabili di separazione, μ è la massa ridotta):

$$W = m\varphi + \int d\vartheta \sqrt{\ell^2 - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta}} + \int dr \sqrt{2\mu E + \frac{2\mu k}{r} - \frac{\ell^2}{r^2}}$$

L'angolo φ compie un intero ciclo $(0, 2\pi)$ e il suo momento coniugato è una costante uguale a m, dunque

$$J_\varphi = |m|$$

(per valore negativo del momento l'intervallo di integrazione cambia verso di percorrenza). L'angolo ϑ invece oscilla tra un valore minimo e uno massimo, dati dalle soluzioni dell'equazione $\sin\vartheta = |m|/\ell$; ne segue

$$J_\vartheta = \frac{1}{2\pi} \oint d\vartheta \sqrt{\ell^2 - m^2/\sin^2\vartheta} = \ell - |m|$$

come si ottiene ad esempio differenziando rispetto ad ℓ:

$$\frac{\partial J_\vartheta}{\partial \ell} = \frac{1}{2\pi} \oint \frac{\sin\vartheta d\vartheta}{\sqrt{\sin^2\vartheta - m^2/\ell^2}} = 1$$

da cui $J_\vartheta = \ell + F(|m|)$. Ma l'integrale è nullo per $\ell = m$, da cui $F(m) \equiv -|m|$.

Si noti che il fatto che $\ell \equiv J_\vartheta + J_\varphi$ è una conseguenza della natura centrale del problema, in quanto la forma esplicita del potenziale non è ancora entrata in gioco. Infine

$$J_r = \frac{1}{2\pi} \oint dr \sqrt{2\mu E + 2\mu k/r - \ell^2/r^2} = \mu k / \sqrt{-2\mu E} - \ell$$

come segue dal calcolo dei residui. Si trova in definitiva

$$\frac{\mu k}{\sqrt{-2\mu E}} = J_r + J_\vartheta + J_\varphi \tag{3.4}$$

Avendo determinato la dipendenza funzionale dell'energia dalle variabili d'azione, le equazioni del moto sono date da

$$\dot{w}_i = \frac{\partial H(J)}{\partial J_i} \equiv \omega_i(J) \to w_i(t) = \omega_i(J)t + w_i(0)$$

La dipendenza delle variabili canoniche (q, p) dalle (J, W) si ottiene invertendo la trasformazione canonica. Ogni variabile (q, p) che sia a un sol valore sullo spazio delle fasi sarà funzione periodica di periodo 2π nelle variabili angolari ed ammette perciò la rappresentazione

$$x(t) = \sum\nolimits^{\lambda_1,\ldots,\lambda_n}_{\lambda_i \in \mathbb{Z}} c_{\lambda_1,\ldots,\lambda_n} \sum \exp\Big\{\sum_j \lambda_j\, \omega_j(J)\, t\Big\}\,.$$

Le $\omega_i(J)$ sono le frequenze fondamentali del sistema. Il moto non è in generale periodico, in quanto le varie frequenze fondamentali non sono

necessariamente commensurabili, ossia non stanno in rapporti razionali. Un sistema separabile è pertanto simile ad un sistema lineare, con la differenza sostanziale che in quest'ultimo caso le frequenze fondamentali sono costanti rispetto alle variabili d'azione. Anche nel caso di frequenze incommensurabili si dimostra tuttavia, con un argomento dovuto a Weinstein [**Wei73**], che per ogni valore dell'energia esistono soluzioni periodiche in numero pari ai gradi di libertà; il teorema, che fa uso di argomenti di tipo topologico, si applica ad ogni sistema, anche non separabile, per il quale la *superficie dell'energia*, cioè la superficie definita nello spazio delle fasi da $H(q,p) = E$, sia regolare e compatta. Nel caso che le frequenze fondamentali siano in rapporti razionali per ogni valore delle variabili d'azione il moto è sempre periodico (si parla di *degenerazione del moto*); è questo il caso per il moto di Keplero, essendo

$$H(J) = -\frac{\mu k^2}{2(J_r + J_\vartheta + J_\varphi)^2}$$

il che comporta che tutte le frequenze fondamentali sono uguali.

Tori invarianti. Una definizione matematicamente accurata delle variabili d'azione è quella basata sulla geometria dello spazio delle fasi per sistemi separabili [**Arn78**]. Assumiano che esistano n integrali primi del moto $I_1, \ldots, I_n$, tali che $\{I_i, I_j\} = 0$ per ogni coppia (i,j); se i vettori normali alla superficie I_i = costante

$$\xi_i = \left(\frac{\partial I_i}{\partial q^k}, \frac{\partial I_i}{\partial p_k}\right)$$

sono linearmente indipendenti, allora esiste un aperto nello spazio delle fasi che ha una struttura di prodotto diretto $T^n \times U$, essendo U un aperto di R^n e T^n è il *toro* a n-dimensioni. Detti γ_i i cicli fondamentali del toro T^n, le quantità

$$J_i = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_i} \sum_k p_k \, dq^k$$

definiscono delle coordinate per l'aperto U mentre le variabili w_i coniugate alle J_i costituiscono coordinate angolari ben definite sul toro.

3.2. Linearizzazione delle equazioni del moto

Un metodo di soluzione ricorrente in molti contesti differenti è quello che consiste nella ricerca di una soluzione approssimata delle equazioni del moto che differisca di poco da una soluzione nota. Ciò permette di discutere la stabilità delle soluzioni. Un caso particolare è quello dello studio di moti intorno a punti di equilibrio (piccole oscillazioni).

3.2.1. Equazioni di Jacobi. Assumiamo che $x(t)$ sia una soluzione periodica delle equazioni del moto non-lineari

$$\frac{d^2}{dt^2}\mathbf{x} = -\nabla V(\mathbf{x})$$

Cerchiamo un'altra soluzione nella forma

$$\mathbf{x}'(t) = \mathbf{x}(t) + \boldsymbol{\xi}(t).$$

Nell'ipotesi che $|\xi|$ si mantenga piccolo per un opportuno intervallo di tempo, si avrà

$$\begin{aligned} \ddot{x}_i + \ddot{\xi}_i &= -\partial_i V(x(t) + \xi(t)) \\ &= -\partial_i V(x(t)) - \partial_i \partial_j V(x(t))\, \xi_j + O(\xi^2) \end{aligned} \tag{3.5}$$

ossia, detta K la matrice Jacobiana di V,

$$\ddot{\xi}_i = -K_{ij}(x(t))\, \xi_j$$

Si dirà che le equazioni così ottenute costituiscono la *linearizzazione* delle equazioni del moto, o equazioni di Jacobi relative alla traiettoria scelta. Dal momento che $x(t)$ è periodica, le equazioni linearizzate sono a coefficienti periodici nel tempo. Equazioni di questo genere sono state studiate in grande dettaglio per la loro importanza in astronomia – la teoria generale è nota come *teoria di Floquet* [**Hoc71**]. Il caso statico ($x(t) =$ *costante*) consiste nello studio dei modi normali di oscillazione intorno a un punto di equilibrio. Se il punto di equilibrio è stabile, il che corrisponde a una matrice K *positiva definita*, esiste una rotazione $\xi_i = R_{ij}\, \xi_j$ indipendente dal tempo grazie alla quale l'equazione si separa in n-equazioni

$$\ddot{\xi}_i' = -\omega_i^2\, \xi_i'$$

essendo ω_i^2 gli autovalori di K. In questo modo si determinano i modi normali di un qualunque sistema meccanico.

PROBLEMA 3.2-5 []Determinare i modi normali di vibrazione di una catena lineare di particelle aventi tutte dalla la stessa massa e accoppiate da forze elastiche agenti tra particelle contigue e caratterizzate tutte dalla stessa costante elastica; le masse all'estremità della catena siano tenute fisse.

SOLUZIONE *[]Si consideri prima il caso di due o tre masse libere di oscillare e si tenti la generalizzazione al caso di n masse. La matrice K è* tridiagonale *con elementi di matrice costanti lungo le diagonali. Le soluzioni sono del tipo $\xi_j \propto \exp(ikj)$. Imponendo che $x_0 = x_{n+1} = 0$ si determina lo spettro delle frequenze dei modi normali. Si veda ad es.* [**?**].

PROBLEMA 3.2-6 []Stesso problema precedente, ma le particelle sono alternativamente di due masse m_1 e m_2.

3.2.2. Risonanza parametrica. Il caso della linearizzazione intorno ad un'orbita periodica ($\mathbf{x}(t+T) = \mathbf{x}(t)$) è assai più complesso e la determinazione dei regimi di stabilità e instabilità richiede un'analisi dettagliata, raramente ottenibile per via puramente analitica. Limitiamoci al caso di un solo grado di libertà. Si avrà da risolvere un'equazione del tipo $\ddot{\xi}(t) = k(t)\,\xi(t)$, con $k(t+T) = k(t)$. È chiaro che se $\xi(t)$ è soluzione tale risulta anche $\xi(t+T)$, che però in generale non coincide con $\xi(t)$, cioè la soluzione non è in generale periodica. Consideriamo due soluzioni linearmente indipendenti $u(t)$ e $v(t)$ caratterizzate da una scelta convenzionale delle condizioni iniziali:

$$\begin{aligned} u(0) = 1, \dot{u}(0) = 0 \\ v(0) = 0, \dot{v}(0) = 1 \end{aligned} \tag{3.6}$$

Per la linearità dell'equazione, la soluzione generale sarà data da

$$\xi(t) = \alpha\, u(t) + \beta\, v(t)$$

con α e β costanti arbitrarie. Dal momento che $u(t+T)$ e $v(t+T)$ sono soluzioni, dovranno essere esprimibili nella forma

$$\begin{aligned} u(t+T) &= a\, u(t) + b\, v(t) \\ v(t+T) &= c\, u(t) + d\, v(t) \end{aligned}$$

I coefficienti (a, b, c, d) si determinano subito ponendo $t = 0$ e imponendo le condizioni iniziali (3.6). Si trova così la matrice

$$\Omega = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u(T) & \dot{u}(T) \\ v(T) & \dot{v}(T) \end{pmatrix}$$

che permette di estendere qualunque soluzione nota in $[0, T)$ a tutto l'asse reale. Infatti si avrà

$$\begin{aligned} \xi(t+T) &= \alpha\, u(t+T) + \beta\, v(t+T) \\ &= (a\alpha + c\beta)u(t) + (b\alpha + d\beta)v(t) \end{aligned}$$

Una traslazione in avanti in t pari a T è rappresentata perciò dall'applicazione

$$(\alpha, \beta) \to (\alpha, \beta)\Omega$$

e in generale la soluzione nell'intervallo $(t + nT, t + (n+1)T)$ è ottenuta applicando Ω^n alla coppia di coefficienti (α, β). La potenza Ω^n si calcola agevolmente nella base in cui Ω è diagonale. Gli autovalori di Ω sono dati dalle soluzioni dell'equazione

$$\omega^2 - \omega\,(u(T) + \dot{v}(T)) + \det(\Omega) = 0$$

Ma per il teorema di Wronski si ha che $\det\Omega = 1$ e perciò il singolo parametro $\Delta = u(T) + \dot{v}(T)$ determina le proprietà della soluzione. Se $\Delta > 2$ otteniamo due radici ω_1, ω_2 *reali e distinte* con prodotto uguale a

uno, il che implica che una di queste (diciamo ω_2) è in modulo maggiore di uno. Ne segue che in questo caso la soluzione è instabile, dal momento che contiene un coefficiente ω_2^n che diverge per $n \to \infty$, il che comporta che per tempi grandi l'approssimazione lineare cade in difetto.

Se $\Delta < 2$ le radici sono complesse di modulo uno e il moto si mantiene limitato – è questo il regime di stabilità. Lo stesso tipo di analisi si applica al caso di sistemi lineari con parametri dipendenti dal tempo e, in tutt'altro contesto, è alla base della teoria delle bande elettroniche in meccanica quantistica (si veda il §6.4).

PROBLEMA 3.2-7 [] Risolvere le equazioni alle variazioni per il moto di un satellite in orbita circolare.

PROBLEMA 3.2-8 []Discutere le condizioni di stabilità per le piccole oscillazioni di un pendolo semplice la cui lunghezza $l(t)$ dipende periodicamente dal tempo secondo la legge

$$l(t+T) = l(t) = \begin{cases} l_1 & \text{per} \quad 0 < t < \frac{1}{2}T \\ l_2 & \text{per} \ \frac{1}{2}T < t < T \end{cases}$$

3.3. Particella carica in campo elettromagnetico

La Lagrangiana

$$L = \tfrac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x}) \cdot \dot{\mathbf{x}} - e\phi(\mathbf{x}) \tag{3.7}$$

descrive una particella di carica e interagente con un campo elettromagnetico caratterizzato dai campi $\mathbf{E} = -\nabla\phi, \mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}$. Infatti le equazioni di Lagrange danno immediatamente le equazioni del moto corrette

$$m\ddot{x}_i = \frac{e}{c}(\dot{\mathbf{x}} \wedge \mathbf{B})_i - e\frac{\partial\phi}{\partial x_i}$$

Il formalismo canonico si ottiene attraverso la trasformata di Legendre:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i + \frac{e}{c}A_i$$
$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + e\phi(\mathbf{x})$$

Nel formalismo canonico entrano dunque in considerazione i potenziali $(\mathbf{A}, \phi)$ come oggetti primari. Si tenga presente che la definizione dei potenziali è sempre assoggettabile ad una *trasformazione di gauge* che non cambia i campi fisici $\mathbf{E}, \mathbf{B}$. Il caso più generale è quello di potenziali e campi dipendenti dal tempo, che conviene descrivere nel formalismo tetradimensionale. Si indica allora con A_μ l'insieme dei potenziali ($A_0 =$

ϕ, $(A_1, A_2, A_3) = \mathbf{A}$), e i campi sono definiti dal sistema di equazioni

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} - \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu}$$

Il *tensore* $F_{\mu\nu}$ condensa in una stessa entità campo elettrico e magnetico, secondo lo schema

$$F = \begin{array}{c} \\ 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} 0 & 1 & 2 & 3 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & E_1 & E_2 & E_3 \\ -E_1 & 0 & B_3 & -B_2 \\ -E_2 & -B_3 & 0 & B_1 \\ -E_3 & B_2 & -B_1 & 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

La trasformazione di gauge

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &\to \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi \\ \phi &\to \psi' = \phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t} \end{aligned} \tag{3.8}$$

(o più sinteticamente $A'_\mu = A_\mu + \partial_\mu\chi$) lascia il campo elettromagnetico immutato. Nella descrizione canonica delle interazioni elettromagnetiche, il momento coniugato $p_i = \dot{x}_i + eA_i/c$ è dipendente dalla scelta di gauge, il che avrà implicazioni importanti in teoria quantistica.

PROBLEMA 3.3-9 [] Dimostrare che per un campo magnetico uniforme e costante diretto nella direzione dell'asse z ($\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$), l'Hamiltoniana si può mettere nella forma

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{eB}{2mc} M_z + O(B^2)$$

dove M_z è la componente z del momento angolare.

SOLUZIONE *[]Si scelga il potenziale vettore nella forma* $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \wedge \mathbf{x}$.

3.3.1. Moto in campo magnetico uniforme. Il problema della dinamica della particella carica in un campo magnetico costante $\mathbf{B}$ pone un quesito interessante: come si concilia la evidente simmetria di traslazione di cui sono dotate le leggi del moto di Newton con l'apparente mancanza di simmetria della Hamiltoniana? Qualunque sia la scelta del potenziale $\mathbf{A}(\mathbf{x})$, l'Hamiltoniana non può essere invariante per traslazione se con questo si intende l'ordinaria trasformazione $\mathbf{x} \to \mathbf{x} + \mathbf{a}$. Tuttavia dal momento che $\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{a})$ deve corrispondere allo stesso campo magnetico costante $\mathbf{B}$ deve esistere una trasformazione di gauge tale che

$$\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{a}) - \mathbf{A}(\mathbf{x}) = \nabla\chi(\mathbf{x}, \mathbf{a}).$$

Ciò comporta che la rottura di simmetria sotto traslazioni può essere corretta da una trasformazione di gauge in modo tale che la trasformazione

risultante

$$\mathbf{x} \to \mathbf{x} + \mathbf{a}$$
$$\mathbf{p} \to \mathbf{p} + \frac{e}{c}\nabla\chi(\mathbf{x}, \mathbf{a})$$

lasci invariante l'Hamiltoniana. È questa dunque la definizione più conveniente di traslazione per una particella in campo magnetico costante, se non altro perché, da un punto di vista utilitaristico, ci offre immediatamente delle costanti del moto e precisamente le funzioni generatrici delle traslazioni infinitesimali che risultano semplicemente

$$G_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{p} - \frac{e}{c}\chi(\mathbf{x}, \mathbf{a}).$$

Se scegliamo la gauge $\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \wedge \mathbf{x}$, si ha in particolare

$$G_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \mathbf{a} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{x} \wedge \mathbf{B}\right),$$

e le costanti del moto sono le seguenti

$$P_1 = p_1 - \frac{eB}{2c}y,\ P_2 = p_2 + \frac{eB}{2c}x,\ P_3 = p_3 \tag{3.9}$$

che si verifica immediatamente avere parentesi di Poisson nulla con

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2m}\left[\left(p_1 + \frac{eB}{2c}y\right)^2 + \left(p_2 - \frac{eB}{2c}x\right)^2 + p_3^2\right].$$

Qual è il significato di queste costanti del moto? Applicando le equazioni del moto troviamo subito

$$P_1 = m\dot{x} - \frac{eB}{c}y$$
$$P_2 = m\dot{y} + \frac{eB}{c}x,$$

da cui segue

$$\frac{d}{dt}\left[\left(x - \frac{c}{eB}P_2\right)^2 + \left(y + \frac{c}{eB}P_1\right)^2\right] = 0,$$

ossia la proiezione delle orbite sul piano xy è sempre circolare e *le costanti del moto* $c/(eB)\,(P_1, P_2)$ *ne rappresentano il centro*. È immediato verificare che le variabili $X = cP_2/eB, Y = -cP_1/eB$ hanno la seguente parentesi di Poisson

$$\{X, Y\} = -\frac{c}{eB}\,.$$

Si può pertanto introdurre un nuovo insieme di coordinate canoniche di cui fanno parte $P_1 = X$ e $Q_1 = eBY/c$. Come esercizio si determini la coppia Q_2, P_2 che completa l'insieme di variabili canoniche.

PROBLEMA 3.3-10 []Discutere la simmetria di traslazione nel caso della scelta di gauge $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$, ricavare le costanti del moto relative e verificare che il loro significato fisico è lo stesso individuato in precedenza.

3.4. Il problema dei due corpi

La dinamica di un sistema isolato costituito da due masse puntiformi m_1, m_2 interagenti attraverso un potenziale statico V, che sia funzione solo della mutua distanza, è noto come *il problema dei due corpi*. Il problema, interamente solubile per via analitica, è nato nella descrizione newtoniana del moto dei pianeti e si applica nella descrizione del modello di atomo di Rutherford. Il problema ammette soluzioni limitate in cui i due corpi rimangono per sempre legati a distanza finita, e moti non-legati, che descrivono eventi di urto. Vedremo come si studiano entrambi i casi.

3.4.1. Separazione del moto del baricentro. La Hamiltoniana del sistema si scrive

$$H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \frac{1}{2m_1}\mathbf{p}_1^2 + \frac{1}{2m_2}\mathbf{p}_2^2 + V(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|)$$

Dalla invarianza della Hamiltoniana sotto traslazioni segue che il momento lineare totale del sistema $\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$ è una costante del moto. Conviene allora scegliere le componenti P_i come coordinate canoniche. La trasformazione canonica si determina facilmente come segue: indichiamo con $\mathbf{Q}$ le componenti delle variabili coniugate a $\mathbf{P}$, e con $(\mathbf{p}, \mathbf{x})$ le rimanenti variabili da aggiungere alle $(\mathbf{P}, \mathbf{Q})$ per completare il quadro delle coordinate canoniche. Assumendo che la trasformazione sia lineare[2], porremo

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2\,, & \mathbf{Q} &= \alpha_1\mathbf{x}_1 + \alpha_2\mathbf{x}_2 \\ \mathbf{p} &= \beta_1\mathbf{p}_1 + \beta_2\mathbf{p}_2\,, & \mathbf{x} &= \gamma_1\mathbf{x}_1 + \gamma_2\mathbf{x}_2\,. \end{aligned}$$

Si può imporre che la trasformazione sia canonica attraverso le relazioni fondamentali (2.5). Si ottiene:

$$\begin{aligned} \left\{Q^i, P_j\right\} &= (\alpha_1 + \alpha_2)\,\delta_{ij} &= \delta_{ij} \\ \left\{x^i, P_j\right\} &= (\gamma_1 + \gamma_2)\,\delta_{ij} &= 0 \\ \left\{Q^i, p_j\right\} &= (\alpha_1\beta_1 + \alpha_2\beta_2)\,\delta_{ij} &= 0 \\ \left\{x^i, p_j\right\} &= (\gamma_1\,\beta_1 + \gamma_2\,\beta_2)\,\delta_{ij} &= \delta_{ij} \end{aligned}$$

Dalla seconda equazione possiamo porre $\beta_1 = -\lambda\alpha_2$, $\beta_2 = \lambda\alpha_1$, per una nuova costante λ. Sostituendo nelle rimanenti equazioni si ottiene $\gamma_1 =$

[2]Il gruppo delle trasformazioni canoniche lineari viene denominato *gruppo simplettico*.

$-\gamma_2 = -1/\lambda$; la soluzione generale comporta quindi due costanti arbitrarie λ e α_1 e si scrive

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P} \\ \mathbf{Q} \\ \mathbf{p} \\ \mathbf{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \alpha_1 & 0 & 1-\alpha_1 \\ -\lambda(1-\alpha_1) & 0 & \lambda\alpha_1 & 0 \\ 0 & -1/\lambda & 0 & 1/\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{p}_1 \\ \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{p}_2 \\ \mathbf{x}_2 \end{pmatrix} \tag{3.10}$$

Tra tutte le infinite soluzioni la più interessante è quella che fa coincidere $\mathbf{Q}$ con il baricentro delle due masse; ciò corrisponde a fissare $\alpha_1 = m_1/(m_1 + m_2)$, mentre l'altro parametro λ si può porre uguale a uno, senza perdita di generalità. Si ha in definitiva il quadro seguente

$$\begin{aligned} &\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \,, \qquad && \mathbf{Q} = \frac{m_1\mathbf{x}_1 + m_2\mathbf{x}_2}{m_1 + m_2} \\ &\mathbf{p} = \frac{m_1\mathbf{p}_2 - m_2\mathbf{p}_1}{m_1 + m_2} \,, && \mathbf{x} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 \,. \end{aligned} \tag{3.11}$$

L'Hamiltoniana nelle nuove coordinate canoniche si trova facilmente essere

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(r) \tag{3.12}$$

dove $r = |\mathbf{x}|$ e si sono introdotte la massa totale $M = m_1 + m_2$ e la cosiddetta *massa ridotta* $\mu = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$. Il problema risulta pertanto separato nel moto del baricentro e nel moto relativo. La dinamica del baricentro è banale (moto rettilineo uniforme), mentre il moto relativo è quello di una particella di massa μ in un campo centrale V. Abbiamo sfruttato la simmetria di traslazione e ridotto il numero di gradi di libertà a quelli del moto relativo. C'è ora un'altra simmetria che può essere utilizzata per ridurre ulteriormente i gradi di libertà, la simmetria di rotazione. In base a questa simmetria il momento angolare totale del sistema $\mathbf{x} \wedge \mathbf{p} + \mathbf{Q} \wedge \mathbf{P}$ si conserva (vedi Probl. 3.4-11). Nel sistema del baricentro la Hamiltoniana risulta invariante rispetto a rotazioni indipendenti delle coordinate $\mathbf{Q}$ e $\mathbf{x}$, il che comporta che anche $\mathbf{M} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{p}$ è costante del moto. Il moto relativo avviene pertanto nel piano ortogonale al vettore costante $\mathbf{M}$ e si riduce quindi a un problema a due gradi di libertà. In coordinate polari nel piano si ha allora l'Hamiltoniana ridotta

$$h = \frac{1}{2\mu}\left(p_r^2 + \frac{p_\varphi^2}{r^2}\right) + V(r)$$

Il residuo di simmetria centrale si manifesta nel fatto che la coordinata φ non compare esplicitamente e quindi il suo momento coniugato è costante del moto (p_φ = costante = $\ell = |\mathbf{M}|$). Il moto è perciò effettivamente ridotto allo studio di un sistema monodimensionale con potenziale efficace $V_{\text{eff}}(r, \ell) = V(r) + \ell^2/2\mu r^2$.

PROBLEMA 3.4-11 [] Dimostrare che nel problema dei due corpi il momento angolare totale è dato da

$$\mathbf{M}_{\text{tot}} = \mathbf{x}_1 \wedge \mathbf{p}_1 + \mathbf{x}_2 \wedge \mathbf{p}_2 = \mathbf{Q} \wedge \mathbf{P} + \mathbf{r} \wedge \mathbf{p}\,.$$

3.4.2. Urti tra particelle. La soluzione dell'equazione di Hamilton-Jacobi nel caso di campo centrale, Eq. (2.11), permette di risolvere immediatamente il problema dell'urto di due masse. L'angolo di deflessione ϑ nel sistema di baricentro si ottiene ponendo $r \to \infty$ e scegliendo $r_0 = r_0(E, \ell)$ uguale alla minima distanza possibile:

$$\begin{aligned}\vartheta &= \pi - 2\Delta\varphi \\ &= \pi - 2\frac{\ell}{\sqrt{2\mu}} \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr/r^2}{\sqrt{E - V_{\text{eff}}(r, \ell)}}\end{aligned}$$

Per il potenziale coulombiano che agisce tra un nucleo di carica Ze e una particella α si ha $V(r) = 2Ze^2/r$; il calcolo dell'integrale è elementare e offre il risultato

$$\varphi = \cos^{-1}\left(\frac{1/r - \mu k/\ell^2}{\sqrt{2\mu E/\ell^2 + (\mu k/\ell^2)^2}}\right)$$

dove $k = 2Ze^2$. Ponendo

$$\eta = \frac{\ell^2}{\mu k}, \quad \varepsilon = \sqrt{1 + \frac{2E\ell^2}{\mu k^2}} \tag{3.13}$$

si ottiene l'equazione

$$\frac{\eta}{r} = 1 + \varepsilon \cos\varphi \tag{3.14}$$

che rappresenta una conica di eccentricità ε, ed infine l'angolo di deflessione

$$\vartheta = \pi - 2\cos^{-1}(1/\varepsilon)\,, \tag{3.15}$$

o, più semplicemente, $\sin\frac{1}{2}\vartheta = \varepsilon^{-1}$. Ora, i parametri naturali per descrivere l'urto sono la velocità iniziale v_∞ e il *parametro d'impatto* b, definiti come segue: in assenza di interazione l'energia è tutta cinetica $E = \mu v_\infty^2/2$ e la traiettoria è rettilinea: sia b la distanza di questa traiettoria "libera" dal centro di interazione. È chiaro che il parametro d'impatto è esprimibile in termini del momento angolare, e precisamente $\ell = \mu v_\infty b$. Sostituendo a (E, ℓ) le nuove variabili (v_∞, b) si ottiene

$$\varepsilon = \sqrt{1 + \mu^2 b^2 v_\infty^4/k^2}\,. \tag{3.16}$$

Il calcolo della *sezione d'urto differenziale* richiede la conoscenza di b in funzione di ϑ, e precisamente

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \frac{b db}{d(\cos\vartheta)} \right| .$$

Combinando l'Eq. (3.15) con la (3.16) si ha allora

$$\begin{aligned} b &= \frac{2Ze^2}{\mu v_\infty^2} \cot\frac{\vartheta}{2} \\ \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \left(\frac{Ze^2}{\mu v_\infty^2}\right) \left(\sin\tfrac{1}{2}\vartheta\right)^{-4} \end{aligned} \tag{3.17}$$

Questa formula rappresenta la sezione d'urto differenziale per diffusione di particelle α da parte di nuclei atomici (**Rutherford**, 1911). La formula, basata interamente sulla meccanica classica, coincide accidentalmente[3] con quella che ricaveremo in base alla meccanica quantistica.

PROBLEMA 3.4-12 []Dimostrare che la sezione d'urto (3.17) si può mettere nella forma

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |\mathcal{A}|^2$$

con

$$\mathcal{A} = \frac{4Ze^2\mu}{|\mathbf{p}_{\text{in}} - \mathbf{p}_{\text{out}}|^2}$$

essendo $\mathbf{p}_{\text{in}}$ e $\mathbf{p}_{\text{out}}$ il momento lineare iniziale e quello finale.

PROBLEMA 3.4-13 [] Dimostrare che nel limite $E \to \infty$ l'angolo di deflessione si può porre nella forma semplificata

$$\vartheta \approx \frac{2k}{\mu b v_\infty} .$$

Verificare che in una descrizione corpuscolare della luce questa formula darebbe una deflessione dei raggi luminosi da parte del Sole nella misura di

$$\vartheta \approx \frac{2G_N M_\odot}{R_\odot c^2} ,$$

(in questo caso si ha $k = G_N \mu M_\odot$) e confrontare questo risultato con il valore previsto dalla Relatività Generale (vedi Probl. 3.4-17).

PROBLEMA 3.4-14 [] Considerare una coppia di particelle cariche (con carica totale zero) immerse in un campo magnetico uniforme e costante nel tempo $\mathbf{B}$. Si determini la Hamiltoniana in termini delle coordinate del baricentro e delle coordinate relative.

[3] Si tratta di una coincidenza che ha contribuito favorevolmente allo sviluppo della fisica atomica!

SOLUZIONE *[]Il problema si affronta più agevolmente a partire dalla Lagrangiana ed effettuando la trasformata di Legendre direttamente sulle coordinate adattate al sistema del centro di massa. La Lagrangiana è data da*

$$L(\mathbf{x}_1, \dot{\mathbf{x}}_1, \mathbf{x}_2, \dot{\mathbf{x}}_2) = \sum_{i=1}^{2} \tfrac{1}{2} m_i \dot{\mathbf{x}}_i^2 - \frac{e_1 e_2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} + \sum_{i=1}^{2} \frac{e_i}{c} \dot{\mathbf{x}}_i \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}_i)$$

Il potenziale A *si può scegliere come* $\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \wedge \mathbf{x}$. *Se inseriamo le formule* (3.11)

$$x_1 = X - \frac{m_2}{M}\mathbf{x}, \; x_2 = X + \frac{m_1}{M}\mathbf{x}, \; e_1 = -e_2 = e$$

otteniamo la nuova Lagrangiana

$$L(\mathbf{X}, \dot{\mathbf{X}}, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = \frac{M}{2}\dot{\mathbf{X}}^2 + \frac{\mu}{2}\dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{e}{2c}\frac{m_2 - m_1}{M}\mathbf{B} \cdot \mathbf{x} \wedge \dot{\mathbf{x}} - \frac{e}{c}\mathbf{B} \cdot \mathbf{x}\dot{\mathbf{X}}$$

dove μ *è la massa ridotta e un termine pari a* $d/dt\,(\mathbf{B} \cdot \mathbf{X} \wedge \mathbf{x})$ *è stato eliminato in quanto non contribuisce alle equazioni del moto. La trasformata di Legendre porta all'Hamiltoniana*

$$H = \frac{1}{2M}\left(\mathbf{P} + \frac{e}{c}\mathbf{B} \wedge \mathbf{x}\right)^2 + \frac{1}{2\mu}\left(\mathbf{p} - \frac{e_*}{2c}\mathbf{B} \wedge \mathbf{x}\right)^2 - \frac{e^2}{r}$$

dove e_* *è una* **carica efficace** *pari a*

$$e_* = \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} e$$

Dal momento che $\mathbf{P}$ *è una costante del moto, la dinamica relativa si può studiare nel riferimento in cui* $\mathbf{P} = 0$*; l'Hamiltoniana ridotta risulta essere*

$$h(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \frac{1}{2\mu}\mathbf{p}^2 - \frac{e_*}{2\mu c}\mathbf{B} \cdot \mathbf{x} \wedge \mathbf{p} + \frac{1}{8\mu}\left(\frac{e}{c}\right)^2 (\mathbf{B} \wedge \mathbf{x})^2 - \frac{e^2}{r}.$$

La correzione all'accoppiamento magnetico dovuta alla presenza di e_* *è sempre piccola per un atomo, dove il rapporto* m_2/m_1 *è* $\leq 5 \times 10^{-4}$ *(vedi* [**BS57**]*), ma ovviamente è assai rilevante per un atomo mesico (protone + muone). È da rilevare che in quest'ultimo caso si dovrebbe però applicare la dinamica relativistica.*

3.4.3. Leggi di Keplero. Completiamo la trattazione del moto in campo centrale, in particolare nel caso del potenziale Newtoniano generato dal Sole considerato come una distribuzione di massa sfericamente simmetrica: $V(r) = -k/r = -G_N M_\odot m/r$. Abbiamo già determinato l'equazione dell'orbita (vedi l'Eq. (3.14); nel Probl. 3.4-15 si troverà un metodo alternativo). La trasformazione canonica allo schema di Hamilton-Jacobi si

completa con il calcolo della variabile coniugata all'energia, che evolve nel tempo secondo l'equazione

$$\begin{aligned}\tau &= \frac{\partial W}{\partial E} = t - t_0 \\ &= \sqrt{\frac{\mu}{2}} \int \frac{dr}{\sqrt{E - V_{\text{eff}}(r, \ell)}}\end{aligned}$$

Per il caso Kepleriano (orbita ellittica, $E < 0$) il calcolo è elementare, e permette di seguire il moto sull'orbita in funzione del tempo. Per ottenere la *terza legge di Keplero* si determina il periodo dell'orbita come segue: indicando con $r_{\min}, r_{\max}$ rispettivamente l'afelio e il perielio, il periodo è dato da

$$T = 2\mu \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} r\, dr \left(2\mu E r^2 + 2\mu k r - \ell^2\right)^{-1/2}$$

L'integrale si valuta in campo complesso deformando il cammino in una circonferenza di raggio $R \to \infty$ e dà il risultato

$$T = \pi\sqrt{\frac{\mu}{2}} k(-E)^{-3/2} = 2\pi \frac{dJ(E)}{dE} \tag{3.18}$$

dove $J(E)$ è l'integrale d'azione. Dall'Eq. 3.14 a p. 45 si ottiene poi

$$r_{\min} + r_{\max} = 2a = 2\ell^2/[\mu k(1 - \varepsilon^2)] = -k/E$$

da cui, combinando il risultato con l'Eq. 3.18, si ottiene

$$T^2/a^3 = (2\pi)^2/G_N(M_\odot + m)$$

Questo mostra che il rapporto T^2/a^3 è lo stesso per tutti i pianeti *a patto di trascurare la massa del pianeta rispetto a quella del Sole*.

PROBLEMA 3.4-15 [] Determinare la costante β in modo che il vettore[4]

$$\mathbf{N} = \mathbf{p} \wedge \mathbf{M} - \beta \frac{\mathbf{r}}{r} \tag{3.19}$$

risulti costante del moto per il moto in campo newtoniano $V = -k/r$. Dimostrare che il vettore $\mathbf{N}$ giace sul piano dell'orbita ed è legato in modo molto diretto all'eccentricità.

SOLUZIONE *[]In base alle equazioni del moto, si trova facilmente che* $\mathbf{N}$ *risulta costante per il particolare valore* $\beta = \mu k$. *È chiaro che* $\mathbf{N}$, *essendo ortogonale a* $\mathbf{M}$, *giace nel piano dell'orbita. Se prendiamo il prodotto scalare con il vettore di posizione* $\mathbf{r}$, *e indichiamo con* φ *l'angolo tra quest'ultimo e* $\mathbf{N}$, *troviamo*

$$\begin{aligned} r|\mathbf{N}|\cos\varphi &= \mathbf{r} \cdot \left(\mathbf{p} \wedge \mathbf{M} - \mu k \frac{\mathbf{r}}{r}\right) \\ &= \ell^2 - \mu k r \end{aligned}$$

[4] Noto come *vettore di Runge–Lenz*, ma in realtà già ben noto a Laplace.

da cui otteniamo immediatamente l'equazione dell'orbita

$$\frac{\ell^2}{\mu k r} = 1 + \frac{|\mathbf{N}|}{\mu k}\cos\varphi$$

il che mostra come la lunghezza di $\mathbf{N}$ *è direttamente proporzionale all'eccentricità.*

PROBLEMA 3.4-16 []Ricavare la III legge di Keplero attraverso un puro argomento dimensionale.

PROBLEMA 3.4-17 [] Secondo la Relatività Generale, la traiettoria di una particella soggetta a un campo gravitazionale è data da una geodetica nello spazio-tempo nella geometria definita da una metrica $g_{\mu\nu}$ soluzione delle equazioni di Einstein; la metrica che corrisponde ad una distribuzione di massa a simmetria sferica (metrica di Schwarzschild) è data da

$$ds^2 = e^{-\nu}\, c^2\, dt^2 - e^{\nu}\, dr^2 - r^2\left(d\vartheta^2 + \sin^2\vartheta\, d\varphi^2\right)$$

dove $e^{-\nu} = 1 - \rho_{\mathcal{S}}/r$, $\rho_{\mathcal{S}} = 2G_N M/c^2$ (raggio di Schwarzschild), G_N è la costante gravitazionale e M è la massa totale[5]. Dimostrare che l'equazione della geodetica nel piano $\vartheta = \frac{1}{2}\pi$ è equivalente alle equazioni di Eulero-Lagrange deducibili dalla Lagrangiana

$$L = -mc\sqrt{e^{-\nu}\, c^2 - e^{\nu}\,\dot{r}^2 - r^2\dot{\vartheta}^2}\,.$$

Si ricavi la Hamiltoniana e da questa si determini l'equazione dell'orbita attraverso il metodo di Hamilton-Jacobi. Si mostri che le traiettorie nel piano r, ϑ sono indipendenti dalla massa m. Si ricavi la formula di Einstein per la **precessione del perielio** ($m \neq 0$) e la **deflessione dei raggi luminosi** ($m = 0$).

SOLUZIONE *[]L'equazione della geodetica è* $\delta\int ds = 0$. *Introducendo* t *come parametro è immediato identificare la Lagrangiana a meno di un fattore di proporzionalità che viene fissato nel limite* $c \to \infty$ *dalla condizione di riottenere la meccanica Newtoniana. Si trova poi l'Hamiltoniana*

$$H = c e^{-\frac{1}{2}\nu}\sqrt{m^2c^2 + p_r^2 e^{-\nu} + \frac{p_\vartheta^2}{r^2}}$$

e si ottiene perciò l'equazione di Hamilton-Jacobi nella forma

$$e^{-\nu}\left(\frac{\partial W}{\partial r}\right)^2 + r^{-2}\left(\frac{\partial W}{\partial \vartheta}\right)^2 = \left(\frac{E}{c}\right)^2 e^{\nu} - m^2c^2\,.$$

Le sostituzioni

$$\mathbf{p} \to \lambda\mathbf{p}\,,\ H \to \lambda H\,,\ m \to \lambda m\,,$$

[5] Si vedano [**LL60, Pau58, Reg80, Piz93**] per una introduzione alla Relatività Generale, [**Edd24**], cap. III, per i calcoli dettagliati relativi alle prime verifiche sperimentali, [**Pau95**] per una visione moderna dei concetti fondamentali di spazio e tempo.

lasciano invarianti le equazioni del moto e perciò le traiettorie si possono studiare nei due casi essenzialmente differenti $m > 0$ *e* $m = 0$*. La separazione delle variabili porta a*

$$W = \ell\,\vartheta + \int dr\, e^{\nu} \sqrt{\left(\frac{E}{c}\right)^2 - (m^2c^2 + \ell^2/r^2)\, e^{-\nu}}\,. \tag{3.20}$$

L'equazione dell'orbita si determina imponendo che $\partial W/\partial\vartheta =$*costante.*

a) $m > 0$*: si pone* $E = mc^2 + E'$ *e si ottiene*

$$\vartheta \approx \vartheta_0 + \ell \int \frac{dr/r^2}{\sqrt{2mE' + 2G_N M m^2/r - (1 - \rho_S/r)\,\ell^2/r^2}}\,.$$

L'integrale si può valutare per via approssimata tenendo solo il primo termine in c^{-2} *e dà per lo spostamento del perielio la formula di Einstein*

$$\Delta\vartheta = 24\pi^3 \frac{a^2}{c^2T^2\,(1-\epsilon^2)} = 3\pi\,\frac{\rho_S}{a\,(1-\epsilon^2)}\,,$$

dove a *è il semiasse maggiore dell'ellisse,* ϵ *è l'eccentricità e* T *è il periodo; numericamente si trova* $\Delta\vartheta \approx 5.70''/a$ *per ogni orbita, se il semiasse è espresso in milioni di km (si vedano* [**LCA74, Pau58**]*).*

b) $m = 0$*: si pone* $E/c = \ell/b$*, introducendo il* parametro d'impatto b*, e si ottiene l'equazione analoga alla* (3.4-17)*. Differenziando si trova (*$u = 1/r$*):*

$$\left(\frac{du}{d\vartheta}\right)^2 + u^2 = b^{-2} + \rho_S\, u^3\,.$$

Ponendo $bu = \sin\vartheta + \delta u$ *si trova in prima approssimazione*

$$\delta u = \frac{\rho_S}{2b}\,(1 + \cos^2\vartheta)\,.$$

La deflessione corrisponde al doppio del valore di ϑ *per cui* $u = 0$ *e quindi si ottiene* $\Delta\vartheta = 2\rho_S/b$ *(se* $b = R_\odot$ *si trova* $\Delta\vartheta \approx 1.76''$*). Si confronti questo risultato con quello che si potrebbe ottenere da un'applicazione della dinamica newtoniana a una particella di velocità* c *(vedi Probl. 3.4-13).*

PROBLEMA 3.4-18 []Secondo il risultato del problema precedente, la correzione relativistica al moto di Keplero è equivalente a un termine adddizionale alla energia potenziale

$$\Delta V = -\frac{\rho_S \ell^2}{2m\,r^3}\,.$$

Determinare la variazione del vettore di Runge-Lenz dovuta a ΔV e valutare per questa via lo spostamento del perielio.

CAPITOLO 4

Elementi di fisica dei mezzi continui

4.1. La fisica matematica delle oscillazioni elastiche

L'apparato matematico elementare della meccanica ondulatoria è ereditato interamente dalla fisica matematica dei mezzi continui, più precisamente dalla fisica che descrive la propagazione di onde in mezzi elastici o la diffusione del calore. Come preparazione agli sviluppi futuri, e per il loro interesse intrinseco, consideriamo alcuni semplici problemi di vibrazioni elastiche.

4.1.1. L'equazione d'onda. Una corda elastica fissa agli estremi si descrive con un'equazione alle derivate parziali nota come equazione delle onde:

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} ,$$

dove $\eta(x,t)$ è lo spostamento dalla posizione di equilibrio e v è un parametro esprimibile in termini della densità ρ (costante) della corda e della tensione τ: $v = \sqrt{\tau/\rho}$. L'equazione ammette come soluzione generale

$$\eta(x,t) = f(x - vt) + g(x + vt) ,$$

come si può facilmente ricavare introducendo nuove variabili $x_+ = x + vt$, $x_- = x - vt$, in termini delle quali l'equazione diviene semplicemente

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial x_+ \partial x_-} = 0 .$$

Questo tipo di soluzione non è tuttavia applicabile all'equazione d'onda in dimensione superiore a due e perciò è più importante considerare un altro schema di soluzione molto più generale. Cerchiamo soluzioni della forma fattorizzata $\eta(x,t) = X(x)\,T(t)$. Sostituendo nell'equazione d'onda si ottiene

$$T(t)\frac{d^2X}{dx^2} = \frac{1}{v^2}\frac{d^2T}{dt^2}X ,$$

da cui, dividendo ambo i membri per XT, si trova

$$\frac{X''}{X} = \frac{1}{v^2}\frac{\ddot{T}}{T} .$$

Dato che il membro di sinistra dell'equazione dipende solo da x mentre quello di destra dipende solo da t, ne segue che ambo i membri devono essere uguali ad una costante, diciamo $-\lambda^2$, in genere denominata *costante di separazione*:

$$\begin{aligned} X''(x) + \lambda^2 X(x) &= 0 \\ \ddot{T}(t) + \lambda^2 v^2 T(t) &= 0 \,. \end{aligned} \tag{4.1}$$

La soluzione generale è ovviamente

$$\begin{aligned} X(x) &= A \sin \lambda x + B \cos \lambda x \\ T(t) &= B \cos(\lambda v (t - t_0)) \,. \end{aligned} \tag{4.2}$$

Se la corda è fissa agli estremi $x = 0, x = L$, dovremo imporre condizioni al contorno[1] $X(0) = X(L) = 0$; mentre la prima condizione è soddisfatta semplicemente fissando $B = 0$, la seconda ci dà

$$A \sin \lambda L = 0 \,.$$

Non può essere $A = 0$, che porta ad una soluzione banale, bensì sarà

$$\lambda L = n\pi \,,$$

per qualche intero positivo n. Le soluzioni possibili sono date perciò (a meno di una costante moltiplicativa) dalla parte reale di

$$\eta_n(x,t) = \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \exp\left\{-i\frac{n\pi v}{L}t\right\} \,. \tag{4.3}$$

Se esaminiamo l'altra possibilità, cioè soluzioni con costante di separazione positiva, troviamo immediatamente che non ci è possibile soddisfare le condizioni al contorno.

Osserviamo che queste soluzioni rappresentano movimenti periodici della corda con frequenze tutte multiple della frequenza fondamentale $\omega = \pi/L$. Questi movimenti sono denominati "modi normali" della corda. Abbiamo perciò determinato la forma più generale delle soluzioni di tipo periodico. Dal momento che l'equazione d'onda è **lineare omogenea** possiamo subito costruire una soluzione molto più generale attraverso una combinazione lineare delle η_n definite dalla Eq. (4.3).

$$\eta(x,t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n \eta_n(x,t) \,, \tag{4.4}$$

dove le infinite costanti arbitrarie A_n assumono valori complessi, in modo da permettere uno sfasamento arbitrario tra i vari modi normali, ma soddisfano la condizione $A_{-n} = -\bar{A}_n$ per assicurare il carattere reale della soluzione.

[1] Si dice che si adottano "condizioni di Dirichlet".

La questione più importante da decidere a questo punto è la seguente: la soluzione (4.4) è davvero la più generale possibile? La risposta può essere data secondo il seguente criterio: la soluzione generale deve essere in grado di riprodurre un'arbitraria condizione iniziale $\eta(x,0) = f(x), \partial\eta/\partial t = u(x)$. Ciò conduce alle equazioni

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n \sin(n\pi x/L) = f(x)$$
$$-i \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n \frac{n\pi v}{L} \sin(n\pi x/L) = u(x) \ ,$$

che diviene[2], tenendo conto delle condizioni cui devono soddisfare i coefficienti A_n

$$2\sum_{n=1}^{\infty} \mathfrak{Re}\, A_n \sin(n\pi x/L) = f(x)$$
$$2\sum_{n=1}^{\infty} \mathfrak{Im}\, A_n \frac{n\pi v}{L} \sin(n\pi x/L) = u(x) \ .$$

Se dunque le condizioni iniziali $f(x)$ e $u(x)$ sono *sviluppabili in serie di Fourier* abbiamo costruito attraverso le formule precedenti la soluzione cercata. Le costanti A_n si determinano grazie alle formule di integrazione (**relazioni di ortogonalità**)

$$\int_0^L dx \sin\frac{n\pi x}{L} \sin\frac{m\pi x}{L} = \tfrac{1}{2} L\, \delta_{nm} \ .$$

La successione di funzioni

$$e_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n\pi x}{L} \ , \quad (n = 1, 2, \ldots)$$

forma un sistema di vettori ortogonali e di lunghezza unitaria nello spazio delle funzioni a quadrato integrabile $\mathcal{L}_2([0,L])$; diremo che il sistema forma una *base ortonormale*, rispetto al prodotto scalare

$$\langle f | g \rangle = \int_0^L \overline{f(x)}\, g(x) dx \ .$$

È importante familiarizzarci in questo esempio, il più semplice possibile, con questo concetto: le soluzioni di una equazione alle derivate parziali lineare omogenea formano uno spazio lineare (a infinite dimensioni); il metodo della fattorizzazione può fornirci una base di vettori in questo spazio in modo che una qualunque soluzione può essere espressa come combinazione lineare di vettori della base.

[2] Ricordiamo la convenzione adottata in tutto il testo: $\mathfrak{Re}\, z$ indica la parte reale del numero complesso z e $\mathfrak{Im}\, z$ la sua parte immaginaria.

PROBLEMA 4.1-1 []Esprimere l'energia della corda vibrante in termini dei coefficienti dello sviluppo in modi normali.

SOLUZIONE *[]Si ricordi che l'energia della corda si esprime come*

$$E[\eta] = \frac{1}{2}\int_0^L dx \left\{ \rho \left(\frac{\partial \eta}{\partial x}\right)^2 + \tau \left(\frac{\partial \eta}{\partial t}\right)^2 \right\}$$

e si applichi la relazione di ortogonalità.

4.1.2. Vibrazione di membrane. Passiamo ora allo studio di una membrana elastica, quale quella di un tamburo: il problema delle vibrazioni si affronta risolvendo l'equazione d'onda in due variabili spaziali con opportune condizioni al contorno. Qualunque sia la forma della membrana è chiaro che esistono modi normali di vibrazione che si possono individuare sperimentalmente utilizzando una luce stroboscopica a frequenza regolabile. Dal punto di vista matematico, se non ci si vuole ricondurre a qualche metodo numerico, si potranno studiare analiticamente solo membrane dotate di particolare simmetria. Il caso di una membrana rettangolare è del tutto banale. L'equazione

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2}$$

per $[0 < x < L_1, 0 < y < L_2]$ si separa agevolemente ponendo $\eta(x,y,t) = X(x)\,Y(y)\,T(t)$; si trovano così i modi normali nella forma

$$\eta_{n_1 n_2} = \sin\frac{n_1 \pi x}{L_1}\sin\frac{n_2 \pi y}{L_2}\cos(\omega_{n_1 n_2}(t - t_0))$$

con $\omega_{n_1 n_2} = \sqrt{n_1^2 + n_2^2}$, n_1, n_2 interi positivi.

Lasciamo al lettore il compito di sviluppare i dettagli, basati ancora sulla trasformata di Fourier. Il caso di una membrana circolare verrà svolto più a fondo, in quanto richiede l'introduzione di elementi di analisi che risulteranno utili in seguito. Per una membrana circolare di raggio r_0 conviene introdurre coordinate polari (r, φ) e scrivere l'equazione d'onda nella forma (si veda l'App. B.3)

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial \eta}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 \eta}{\partial \varphi^2} = -\left(\frac{\omega}{v}\right)^2 \eta\,,$$

avendo già selezionato soluzioni periodiche di frequenza ω. La separazione delle variabili $\eta = R(r)\,\Phi(\varphi)$ offre il seguente schema (indichiamo per semplicità con un apice la derivata rispetto all'unico argomento)

$$\frac{1}{r}(rR')'\Phi + \frac{1}{r^2}R\Phi'' + \left(\frac{\omega}{v}\right)^2 R\,\Phi = 0\,.$$

Dividiamo per $R\Phi$, poniamo $\omega/v = k$ e otteniamo

$$\frac{1}{rR}(rR')' + \frac{1}{r^2\Phi}\Phi'' + k^2 = 0\,,$$

ovvero, isolando il termine che dipende dall'angolo,

$$-\frac{\Phi''}{\Phi} = r^2\left(\frac{1}{rR}(rR')' + k^2\right)\,.$$

Dato che r e φ sono indipendenti i due membri di questa equazione devono essere uguali ad una medesima costante, chiamiamola $-m^2$. Ne ricaviamo perciò due equazioni ordinarie

$$\Phi'' + m^2\Phi = 0 \tag{4.5}$$

$$\frac{1}{rR}(rR')' + \left(k^2 - \frac{m^2}{r^2}\right)R = 0\,. \tag{4.6}$$

La prima è ovviamente risolta da $\Phi(\varphi) = \exp(im\varphi)$; dato che per la continuità della funzione η dobbiamo richiedere che Φ sia periodica di periodo 2π in φ, la costante m è costretta ad assumere valori interi. L'equazione in R è ben nota fin dal secolo scorso come **equazione di Bessel**. Ne studiamo la soluzione con il (vedi l'App. B.6). Innanzitutto si ponga $R(r) = r^\lambda u(r)$ per ricondursi ad una equazione in cui compaiano coefficienti più semplici; la scelta $\lambda = |m|$ porta alla seguente

$$ru'' + (2|m| + 1)u' + k^2ru = 0$$

che è risolubile con il metodo di Laplace: sostituendo la rappresentazione integrale

$$u(r) = \int_\Gamma e^{zr}F(z)\,dz$$

nell'equazione differenziale e integrando per parti otteniamo

$$0 = (z^2 + k^2)e^{zr}F(z)\Big|_{\gamma_1}^{\gamma_2} + \int_\Gamma \left\{(2|m| + 1)zF(z) - \frac{d}{dz}\left[(z^2 + k^2)F(z)\right]\right\}e^{zr}dz\,,$$

che è risolta da $F(z) = (z^2+k^2)^{|m|-\frac{1}{2}}$ a patto di fissare la curva di integrazione Γ in modo che i contributi finiti dell'integrazione per parti svaniscano. Ciò si realizza scegliendo per Γ il segmento che congiunge $-ik$ a ik. Si

n	$m = 0$	$m = 1$	$m = 2$	$m = 3$
1	2.40483	3.83171	5.13562	6.38016
2	5.52008	7.01559	8.41724	9.76102
3	8.65373	10.1735	11.6198	13.0152
4	11.7915	13.3237	14.7960	16.2235
5	14.9309	16.4706	17.9598	19.4094
6	18.0711	19.6159	21.1170	22.5827
7	21.2116	22.7601	24.2701	25.7482
8	24.3525	25.9037	27.4206	28.9084
9	27.4935	29.0468	30.5692	32.0649
10	30.6346	32.1897	33.7165	35.2187

TABELLA 4-1. *Zeri delle funzioni di Bessel* $J_m(x)$.

ottiene così

$$\begin{aligned} R_m(r) &= r^{|m|} \int_{-ik}^{ik} e^{zr}(z^2 + k^2)^{|m|-\frac{1}{2}} dz \\ &\propto (kr)^{|m|} \int_{-1}^{1} \exp(ikr\xi)(1 - \xi^2)^{|m|-\frac{1}{2}} d\xi \\ &\equiv J_m(kr) \ . \end{aligned}$$

La condizione al contorno di annullamento sul bordo circolare $\eta(r_0) = 0$ seleziona i valori ammessi di k e quindi della frequenza, determinando così il *timbro* della membrana. L'equazione

$$J_m(kr_0) = 0$$

ammette infinite soluzioni

$$k = k_m^{(1)} < k_m^{(2)} < \ldots < k_m^{(n)} < \ldots$$

che corrispondono a modi di vibrazione con un numero di linee nodali (radiali) pari all'indice superiore diminuito di uno. Da un calcolo numerico si ottiene la Tab. 4-1. È facile ottenere l'andamento asintotico delle frequenze $\omega_m^{(n)}$ per grandi valori di n in quanto le funzioni J_m sono bene approssimate per grandi valori dell'argomento dalla formula

$$J_m(x) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin(x - \tfrac{1}{2}(m - \tfrac{1}{2})\pi) \ ,$$

da cui si deduce $k_m^{(n)} r_0 \sim n\pi + (m - \frac{1}{2})\frac{\pi}{2}$.

Le proprietà delle funzioni di Bessel (vedi ad esempio [**AS65, Hoc71**]) si possono facilmente studiare riconducendosi alla $J_0(x)$ in base alla relazione di ricorrenza

$$J_{m+1}(x) \propto x^m \frac{d}{dx} x^{-m} J_m(x)$$

che segue direttamente dalla rappresentazione integrale. Per la $J_0(x)$ si ha poi

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{ix\cos\vartheta}\, d\vartheta$$

e l'espressione asintotica precedente si ottiene con il "metodo di punto a sella" [**BRS93**].

PROBLEMA 4.1-2 []Determinare i modi propri di oscillazione per la pressione di un gas perfetto in una cavità sferica.

PROBLEMA 4.1-3 []Determinare la frequenza fondamentale di vibrazione per una lamina elastica avente la forma di un triangolo rettangolo isoscele.

Abbiamo così ottenuto le frequenze proprie di vibrazione di una lamina elastica circolare. La frequenza fondamentale è data da $\omega_{10} = 2.40483\, v/r_0$ e tutte le altre si leggono dalla Tab. 4-1. Il timbro di un tamburo sarà poi determinato anche dalle frequenze proprie della cavità risonante e quindi il problema risulta in realtà molto più complesso.

4.1.3. Armoniche sferiche. Consideriamo ora un problema la cui soluzione trova applicazione ad un'intera classe di problemi con simmetria sferica e in particolare ci servirà in meccanica quantistica per calcolare gli spettri atomici.

Si consideri l'equazione d'onda per un mezzo elastico omogeneo all'interno di una sfera di raggio a:

$$\Box\phi(t,\boldsymbol{x}) \equiv \frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} - \triangle\phi(t,\boldsymbol{x}) = 0\,,$$

dove il simbolo $\Box$ è noto come **operatore di D'Alembert**, mentre il simbolo $\triangle$ indica l'operatore di Laplace

$$\triangle\phi = \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\,.$$

Le condizioni al contorno sulla superficie possono essere fissate in modo diverso a seconda della fisica del problema e non sono rilevanti, per il momento. La simmetria sferica suggerisce di risolvere il problema introducendo coordinate polari (r,ϑ,φ). Per onde di frequenza ω, $\phi = \exp\{i\omega t\}\, u(\boldsymbol{x})$, l'equazione si scrive nella forma seguente (equazione di Helmholtz):

$$\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(ru) + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial u}{\partial\vartheta} + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2} + k^2 u = 0\,. \tag{4.7}$$

Scrivendo $u = \mathcal{R}(r)Y(\vartheta, \varphi)$ l'equazione si fattorizza nelle due equazioni

$$\begin{aligned} &\frac{1}{r^2 \sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial Y}{\partial\vartheta} + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} = \lambda Y \\ &\frac{1}{r}(r\mathcal{R}(r))'' + \frac{\lambda}{r^2}\mathcal{R}(r) + k^2\mathcal{R}(r) = 0\,. \end{aligned} \tag{4.8}$$

Si nota che l'equazione per la parte che dipende dagli angoli è *indipendente dalle condizioni al contorno*, ma addirittura è indipendente dal valore del numero d'onda. Ne segue che possiamo cercare la soluzione per Y nel caso più semplice, $k = 0$, che corrisponde all'equazione di Laplace ($\triangle u = 0$). In questo caso possiamo fare ricorso ad un'ulteriore simmetria dell'equazione, e cioè la simmetria per dilatazione: se $\triangle u(x, y, z) = 0$ allora anche $\triangle u(\rho x, \rho y, \rho z) = 0$ per qualunque costante positiva ρ. D'altro canto l'equazione di Laplace ammette soluzione in termini di polinomi nelle variabili cartesiane; siamo dunque ricondotti a cercare una soluzione in termini di *polinomi omogenei*. Si trova che l'introduzione della coordinata complessa $\eta = x + iy$ permette di semplificare notevolmente il calcolo. Indicando con l il grado del polinomio, si avrà

$$u(x, y, z) = \sum_{p,q} c_{pq}\eta^p\bar{\eta}^q z^{l-p-q}$$

e l'equazione di Laplace sarà ricondotta ad una relazione algebrica sui coefficienti $\{c_{pq}\}$. Si ha

$$\triangle = 4\frac{\partial}{\partial\eta}\frac{\partial}{\partial\bar{\eta}} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

e pertanto

$$\begin{aligned} \triangle u = \sum_{p,q} c_{pq}\Big(&4\,p\,q\,\eta^{p-1}\bar{\eta}^{q-1}z^{l-p-q} + \\ &(l-p-q)(l-p-q-1)\,\eta^p\bar{\eta}^q z^{l-p-q-2}\Big) = 0 \end{aligned}$$

che si trasforma nella relazione di ricorrenza

$$4\,(p+1)(q+1)\,c_{p+1\,q+1} + (l-p-q)(l-p-q-1)\,c_{pq} = 0\,.$$

Tutte le soluzioni si trovano allora facilmente tenendo conto che bisogna soddisfare i vincoli

$$p \geq 0,\ q \geq 0,\ p + q \leq l\,.$$

Assegnato un valore arbitrario a c_{p0} con $0 \leq p \leq l$ e a c_{0q} con $1 \leq q \leq l$, l'equazione di ricorrenza ci permette di calcolare tutti gli altri coefficienti. Indichiamo con Y_l^l il polinomio che corrisponde ad avere fissato tutti i coefficienti $c_{p0} = c_{0q} = 0$, tranne $c_{l0} = 1$. Indichiamo poi con Y_l^{l-1} il polinomio che corrisponde a $c_{l-1\,0} = 1$, fino ad arrivare a Y_l^0 che corrisponde a

$c_{00} = 1$. Indicheremo poi con un indice negativo le soluzioni che corrispondono a $c_{0q} = 1 \Rightarrow Y_l^{-q}$. A questo punto abbiamo costruito $2l+1$ *soluzioni linearmente indipendenti dell'equazione di Laplace in forma di polinomi omogenei nelle variabili cartesiane*. Per loro natura questi polinomi sono della forma (per $m < 0$ si scambiano i ruoli di η e $\bar{\eta}$):

$$\begin{aligned} r^l Y_l^m &= \sum_k c_{m+k,k} \eta^{m+k} \bar{\eta}^k z^{l-m-2k} \\ &= r^l e^{im\varphi} \sum_k c_{m+k,k} \sin^{2k}\vartheta \cos^{l-k-2k}\vartheta \,. \end{aligned}$$

Ogni soluzione Y_l^m è perciò esprimibile come il prodotto di $e^{im\varphi}$ per un polinomio in $\cos\vartheta$ e $\sin\vartheta$, noto come **funzione associata di Legendre**. Queste funzioni sono denominate **armoniche sferiche**[3] e saranno utilizzate anche nella soluzione di problemi di meccanica quantistica dotati di simmetria centrale. Di esse è importante ricordare la seguente proprietà, detta *relazione di ortogonalità*

$$\int_0^\pi \sin\vartheta \, d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \, \overline{Y_l^m(\vartheta,\varphi)} \, Y_{l'}^{m'}(\vartheta,\varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \,. \tag{4.9}$$

Inoltre vale uno sviluppo che generalizza la serie di Fourier per le funzioni definite sulla sfera

$$f(\vartheta,\varphi) = \sum_{lm} f_{lm} Y_l^m(\vartheta,\varphi)$$

che può essere risolto per i coefficienti f_{lm} proprio grazie alle relazioni di ortogonalità.

Il punto cruciale è ora il seguente: dall'equazione $\triangle r^l Y_l^m = 0$ si ha subito

$$r^l \frac{1}{r^2 \sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \sin\vartheta \frac{\partial Y}{\partial\vartheta} + \frac{1}{r^2 \sin^2\vartheta} \frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} = -\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r\, r^l Y = -l(l+1) r^{l-2} Y \,,$$

ossia $\lambda \equiv -l(l+1)$.

PROBLEMA 4.1-4 []Si determini lo spettro delle frequenze acustiche di una cavità sferica.

SOLUZIONE *[]Avendo risolto in generale l'equazione che dipende dalle variabili angolari, resta solo da discutere la soluzione dell'equazione radiale*

$$\frac{1}{r}(rR(r))'' + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) R(r) = 0 \,.$$

[3] Le funzioni Y_l^m sono espresse in termini di funzioni di Legendre nella forma

$$Y_l^m = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \, P_l^{|m|}(\cos\vartheta) \exp\{im\varphi\}$$

.

n	j_0	j_1	j_2	j_3	j_4
1	3.141593	4.493409	5.763459	6.987932	8.182561
2	6.283185	7.725252	9.095011	10.41712	11.70490
3	9.424778	10.90412	12.32294	13.69802	15.03966
4	12.56637	14.06619	15.51460	16.92362	18.30125
5	15.70796	17.22076	18.68904	20.12181	21.52541
6	18.84956	20.37130	21.85387	23.30425	24.72756
7	21.99115	23.51945	25.01280	26.47676	27.91557
8	25.13274	26.66605	28.16783	29.64260	31.09393
9	28.27433	29.81160	31.32014	32.80373	34.26539
10	31.41593	32.95639	34.47049	35.96141	37.43173
11	34.55752	36.10062	37.61937	39.11647	40.59418
12	37.69911	39.24443	40.76712	42.26951	43.75360

TABELLA 4-2. *Zeri delle funzioni di Bessel sferiche* $j_l(x)$.

Conviene introdurre la funzione $\phi_l(kr) \equiv r^{-l}R(r)$ *che soddisfa all'equazione*

$$\xi\phi_l(\xi)'' + 2(l+1)\phi_l(\xi)' + \phi_l(\xi) = 0, \text{ con } \xi = kr\,,$$

che è del tipo di Laplace. La soluzione si esprime in termini di combinazioni di potenze e di funzioni trigonometriche ed è legata alle funzioni di Bessel sferiche $\phi = \xi^{-l}j_l(\xi)$ *(vedi l'App. B.6.2). Per determinare le possibili frequenze di vibrazione (lo spettro acustico) si tratta di imporre la condizione di annullamento sulla superficie della cavità. Detto* a *il raggio si avrà* $j_l(ka) = 0$. *Si noti che per le onde a simmetria sferica (*$l = 0$*) si ha semplicemente* $j_0(x) = \sin(x)/x$ *e perciò lo spettro dei modi simmetrici è dato da* $k_{0,n} = n\pi/a$. *Per* $l \neq 0$ *si conosce l'andamento asintotico degli zeri, ma i modi più "bassi" sono da calcolare numericamente. La Tab. 4-2 riporta i primi valori per* $l \leq 4$.

4.2. Principi variazionali in teoria dei mezzi continui

Principi variazionali simili a quello di Eulero-Lagrange vengono adottati in molti campi della fisica e permettono di esprimere in modo conciso le leggi del moto anche per sistemi a infiniti gradi di libertà. L'equazione d'onda che descrive la propagazione di piccole oscillazioni in un mezzo elastico, le equazioni di Maxwell dell'elettromagnetismo, le equazioni del campo gravitazionale di Einstein, tutte ammettono una formulazione di tipo lagrangiano e sono perciò esprimibili attraverso un principio variazionale. Ad esempio l'equazione d'onda

$$\triangle\psi = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}$$

è equivalente al principio variazionale

$$\delta S[\psi] = \delta \int g^{\mu\nu}\, \partial_\mu \psi\, \partial_\nu \psi\, d^4x = 0\ ,$$

dove μ assume i valori $0, 1, 2, 3$, la metrica g è quella di Minkowski ($g_{00} = 1, g_{11} = g_{22} = g_{33} = -1$, $g_{ij} = 0$ per $i \neq j$), la coordinata x_0 si identifica con ct e l'elemento di volume $dx_0 dx_1 dx_2 dx_3$ è indicato succintamente con d^4x. Per semplicità, abbiamo abbreviato $\partial\psi/\partial x_\mu$ in $\partial_\mu\psi$.

Invece di dimostrare la validità del principio variazionale in questo caso particolare è più conveniente affrontare un caso più generale, per una teoria caratterizzata dall'azione

$$S[\psi] = \int \mathcal{L}(\psi(x), \partial_\mu\psi(x))\, d^4x\ .$$

Sotto una piccola variazione $\psi \to \psi + \delta\psi$, con $\delta\psi$ nulla al di fuori di una regione compatta dello spazio-tempo, si avrà, integrando per parti

$$\begin{aligned}
\delta S &= \int \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta\psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \delta\partial_\mu \psi \right] d^4x \\
&= \int \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta\psi - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)}\, \delta\psi \right] d^4x \\
&= \int \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \partial_\mu\, \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \right] \delta\psi\, d^4x\ .
\end{aligned}$$

Imponendo che l'azione sia stazionaria per $\delta\psi$ arbitraria (ad esempio $\delta\psi$ può essere scelta diversa da zero dappertutto tranne che in una regione arbitrariamente piccola centrata intorno a un punto qualunque x_μ), si ottengono le equazioni del campo ψ in forma lagrangiana:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} = \sum_\mu \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \right)\ .$$

Notare che l'espressione $\partial\mathcal{L}/\partial(\partial_\mu\psi)$ è da interpretare in modo analogo alla $\partial\mathcal{L}/\partial\dot{x}$ nel caso del punto materiale. Nell'effettuare le derivazioni parziali, cioè, la ψ e tutte le sue derivate parziali $\partial_\mu\psi$ sono da considerare variabili indipendenti.

PROBLEMA 4.2-5 []Ricavare l'equazione d'onda di una corda elastica con densità ρ sottoposta ad una tensione τ; mostrare che la Lagrangiana si può scrivere

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\rho \frac{\partial \eta}{\partial t}^2 - \frac{1}{2}\tau \frac{\partial \eta}{\partial x}^2$$

dove η rappresenta lo scostamento dalla posizione di equilibrio.

PROBLEMA 4.2-6 []Il campo elettromagnetico $(\mathbf{E}, \mathbf{B})$ si può esprimere in temini di potenziali $(\phi, \mathbf{A})$ come segue: $\mathbf{E} = -\nabla\phi + \partial\mathbf{A}/\partial x_0, \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Dimostrare che dall'azione

$$S = \int \left(\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2 + \rho\phi - \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}\right) d^4x$$

si ricavano le equazioni di Maxwell che contengono la densità di carica e di corrente; spiegare inoltre l'origine delle rimanenti equazioni che contengono il rotore di $\mathbf{E}$ e la divergenza di $\mathbf{B}$.

PROBLEMA 4.2-7 []Dimostrare che l'operatore di Laplace assume la forma seguente quando venga espresso in un sistema di coordinate qualunque

$$\triangle\varphi = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} , \tag{4.10}$$

applicando il principio variazionale secondo cui l'equazione $\triangle\varphi = 0$ si ottiene come equazione di Eulero-Lagrange a partire dall'azione

$$\mathcal{A} = \int \sqrt{g}\, d^3x\, g^{ij} \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} ,$$

dove g_{ij} è la matrice metrica (vedi l'Eq. (1.2)), $g \equiv \det g_{ij}$ ed infine g^{ij} è la matrice inversa della matrice metrica.

SOLUZIONE *[]Dall'equazione variazionale segue subito*

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} = 0 ,$$

da cui individuiamo l'operatore di Laplace come il membro di sinistra di quest'ultima equazione, a meno di un fattore moltiplicativo arbitrario (dipendente dalle coordinate). Dal momento che $\int \triangle\varphi\sqrt{g}\, d^3x \equiv 0$ *per ogni* φ *a supporto compatto, si conclude che il fattore moltiplicativo deve essere proporzionale a* $1/\sqrt{g}$*, e la costante che rimane ancora da determinare è fissata al valore* uno *semplicemente valutando il caso banale delle coordinate cartesiane.*

4.3. Il quadro generale

Facendo astrazione dai particolari accidentali dei problemi che abbiamo incontrato finora, possiamo riassumere gli aspetti matematici fondamentali di questo genere di problemi fisici[4] come segue:

a) si tratta di risolvere un'*equazione differenziale lineare alle derivate parziali* $L\eta = 0$, dove L è un qualche operatore differenziale lineare (di tipo iperbolico).

[4]Per tutto l'apparato matematico relativo a questa struttura di spazi e operatori lineari si veda ad es.[**BRS93**].

b) Lo specifico problema fisico detta alcune condizioni al contorno sulla incognita η, tipicamente l'annullamento di η su una superficie preassegnata ovvero l'annullamneto della sua derivata normale o più in generale di una combinazione lineare delle due.
c) È individuabile un funzionale $E[\eta, \partial\eta]$ che rappresenta l'energia del mezzo e che si conserva nella evoluzione temporale.
d) È in genere definibile un secondo funzionale bilineare, indicato ad esempio con $\langle \eta_1, \eta_2 \rangle$ che gode delle proprietà tipiche di un prodotto scalare ($\langle \eta, \eta \rangle \geq 0$, $\langle \eta_1, \eta_2 \rangle = \langle \eta_2, \eta_1 \rangle$) e che fornisce allo spazio delle configurazioni una struttura di spazio metrico. Tipicamente si avrà

$$\langle \eta_1, \eta_2 \rangle = \int \eta_1(x,t)\eta_2(x,t)\, dx\,,$$

ma altre scelte sono dettate dalla forma particolare dell'operatore L.
e) L'operatore L nel caso delle onde elastiche ha la forma[5]

$$L = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - X\,,$$

e i modi normali sono individuati dalle soluzioni dell'equazione

$$X\eta = -\omega^2\eta \tag{4.11}$$

che rispettano le condizioni al contorno. L'operatore X si assume rispettare la condizione di simmetria

$$\langle \eta_1, X\eta_2 \rangle = \langle X\eta_1, \eta_2 \rangle\,.$$

Sotto condizioni molto generali allora le soluzioni della Eq. (4.11), dette *autofunzioni* del problema, formano una *base* per lo spazio delle configurazioni e cioè lo sviluppo

$$\eta = \sum_\omega c_\omega \eta_\omega$$

si comporta essenzialmente come la trasformata di Fourier. Come per quest'ultima è possibile invertire lo sviluppo semplicemente con

$$c_\omega = \langle \eta_\omega, \eta \rangle\,.$$

Ciò discende dalla **proprietà di ortogonalità**

$$\langle \eta_{\omega_1}, \eta_{\omega_2} \rangle = \delta_{\omega_1\omega_2}\,.$$

Lo schema andrebbe precisato ulteriormente nei suoi dettagli matematici, ma i suoi aspetti essenziali sono stati delimitati. Vedremo che questo schema, applicabile a problemi tanto semplici come quelli che abbiamo illustrato o così complessi come l'acustica di una grande sala di audizioni,

[5] I familiari fenomeni di propagazione ondosa che si osservano più facilmente in natura non rientrano necessariamente in questa descrizione: tipicamente le onde sulla superficie di un liquido richiedono una descrizione ben più elaborata.

si applicherà con minime variazioni alla nuova meccanica quantistica, nonostante che i principi fisici su cui quest'ultima si basa siano totalmente differenti da quelli della meccanica dei mezzi continui. In particolare la linearità dell'equazione fondamentale (l'equazione di Schroedinger) non è frutto di approssimazioni ("piccole oscillazioni") bensì rappresenta una proprietà fondamentale della fisica alla scala atomica[6].

[6] Su questo punto l'ultima parola non è forse ancora stata detta (si veda ad es.[**Wei89**]).

Parte 2

Meccanica quantistica

CAPITOLO 5

Quanti e onde

5.1. La vecchia teoria dei quanti

Track 1

Nei precedenti capitoli abbiamo illustrato i fondamenti teorici su cui si basa la descrizione classica del mondo fisico. Essa consiste in due tipi ben distinti di rappresentazioni meccaniche: da un lato c'è la materia, composta di molecole, atomi o comunque di parti microscopiche più o meno elementari, numerabili e dotate di massa, che potremmo genericamente chiamare "particelle"; dall'altro ci sono i mezzi continui. Non possiamo considerare questi ultimi solo come una conveniente approssimazione di sistemi composti da molte particelle, dato che esistono mezzi continui senza alcun substrato materiale, i "campi", come il campo elettromagnetico e quello gravitazionale. In ogni caso, secondo la fisica classica, sia le particelle che i campi ubbidiscono a leggi deterministiche del moto, siano esse in forma di equazioni differenziali ordinarie o alle derivate parziali, che coinvolgono variabili dinamiche misurabili, in linea di principio, con precisione grande a piacere. Questa visione classica della natura era stata completata, eccezion fatta per quanto riguarda il campo gravitazionale, già prima della fine del secolo scorso. Essa si fondava sulle equazioni di Hamilton, o di Hamilton-Jacobi, per le particelle e sulle equazioni di Maxwell per il campo elettromagnetico. Ma già agli inizi del nuovo secolo la fisica classica era profondamente in crisi. Come vedremo dall'esame degli esempi più rilevanti (esame fatto senza pretese di completezza né di ordine storico-cronologico), la contraddizione fondamentale della meccanica classica risiede proprio nella separazione concettuale tra particelle, dotate di un numero finito di gradi di libertà, e campi, dotati di un numero infinito di gradi di libertà. Questa profonda disparità della descrizione classica rende problematica, se non del tutto impossibile, la stabilità della materia di fronte alla radiazione. Inoltre l'evidenza sperimentale impone di riconoscere alla materia stessa sorprendenti proprietà ondulatorie ed alla radiazione una natura anche corpuscolare. In questo capitolo illustreremo questi aspetti apparentemente contraddittori e la loro riconciliazione in uno schema teorico nuovo, tutto sommato abbastanza semplice e molto

convincente[1].

5.1.1. Il corpo nero. La fisica classica incontra subito una grave difficoltà nella descrizione del **corpo nero**, cioè di un oggetto materiale in grado di assorbire tutta la radiazione elettromagnetica incidente su di esso. L'esempio tipico è rappresentato dall'interno di una cavità risonante, le cui pareti, mantenute ad una temperatura T, emettono ed assorbono di continuo radiazione elettromagnetica per rispettare l'equilibrio termodinamico. La grandezza fisica rilevante è la densità di energia per unità di volume e frequenza, $u(\nu, T)$, contenuta nel campo elettromagnetico.

Alla fine del secolo scorso erano note due espressioni teoriche per $u(\nu, T)$. La cosiddetta **legge di Wien**,

$$u(\nu, T) = a\nu^3 e^{-b\nu/T} ,$$

con a e b costanti universali, era in accordo con gli esperimenti per frequenze abbastanza grandi, ma era nettamente violata a basse frequenze. Al contrario, la formula di **Rayleigh-Jeans**,

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T , \tag{5.1}$$

era in ottimo accordo con ls regione infrarossa dello spettro di emissione del corpo nero, ma perdeva significato nel regime ultravioletto, prevedendo una divergenza dell'energia contenuta dal campo elettromagnetico in un volume finito. In effetti questo era proprio dovuto all'ipotesi che gli infiniti modi normali del campo potessero interagire classicamente con le molecole delle pareti, finendo per ubbidire alla legge di equipartizione dell'energia. Un oscillatore armonico soggetto alla statistica di Boltzmann ha l'energia media a temperatura T

$$\langle E \rangle_{\text{classica}} = \frac{\int_0^\infty dE\, E \exp(-E/k_B T)}{\int_0^\infty dE \exp(-E/k_B T)} = k_B T ,$$

mentre in ogni intervallo di frequenza tra ν e $\nu + d\nu$ vi sono $2(4\pi/c^3)\nu^2 d\nu$ modi normali per unità di volume. Il fattore 2 è dovuto ai due stati di polarizzazione della radiazione elettromagnetica, mentre il resto segue dalla leggi di dispersione $2\pi\nu = c|\mathbf{k}|$ tra la frequenza ed il vettore numero d'onda $\mathbf{k}$.

[1] In effetti qui ci sofferemeremo poco sulla fisica dei "corpuscoli" della radiazione elettromagnetica, i cosiddetti *fotoni*. L'attenzione sarà piuttosto rivolta alle cosiddette "onde materiali". La ragione è che la corretta trattazione dei fotoni, che sono privi di massa, richiede il formalismo della "seconda quantizzazione" (vedi il §12.3 per una breve introduzione), integrato dai principi di simmetria della relatività ristretta. Risulta invece possibile trattare in modo consistente una singola particella massiva in regime nonrelativistico.

All'inizio del 1900 Planck propose la seguente interpolazione tra le due formule precedenti

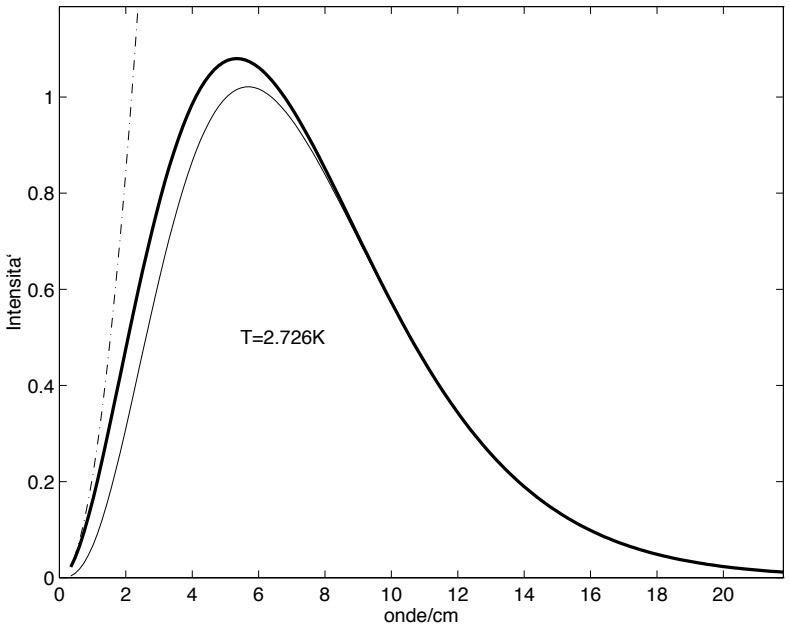


FIGURA 5-1. *La formula di Planck a* $T = 2.726$ K. *Sono riportate in tratto fine e a tratteggio le formule di Wien e di Rayleigh-Jeans. Lo spettro della radiazione di fondo cosmica secondo le rilevazioni di* COBE *è indistinguibile, su questa scala del diagramma, dalla formula di Planck.*

$$\boxed{u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{\exp(h\nu/k_B T) - 1}} \tag{5.2}$$

dove h è nota appunto come *costante di Planck* (vedi la tabella a p. 519). Dopo l'accurata verifica sperimentale della Eq. (5.2)[2], Planck dimostrò come essa discenda dall'assunzione rivoluzionaria che l'energia di un dato modo normale del campo elettromagnetico non è una variabile continua, ma può assumere solo i valori discreti

$$E_n = n\,h\,\nu\,, \quad n \in \mathbb{N} \text{ (intero nonnegativo).} \tag{5.3}$$

[2] Attualmente l'evidenza più forte della validità della legge di Planck viene dai dati relativi alla "radiazione fossile" del fondo cosmico – si veda [**M⁺90**] oppure, per informazioni aggiornate, si consulti l'indirizzo `http://www.gsfc.nasa.gov/astro/cobe` su *Internet*.

In tal caso infatti si ottiene il valor medio per l'energia a temperatura T

$$\langle E\rangle_{\text{Planck}} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n \exp(-E_n/k_B T)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-E_n/k_B T)} = \frac{h\nu}{\exp(h\nu/k_B T) - 1},$$

che subito riproduce la (5.2) una volta moltiplicata per la densità di modi normali, $(8\pi/c^3)\nu^2$.

L'interpretazione di questo risultato è che la radiazione elettromagnetica si manifesta sotto forma di **quanti** indivisibili di energia (i **fotoni** nella terminologia corrente). L'interazione con le molecole delle pareti causa solo variazioni del numero di quanti presenti in ciascun modo normale, dovute all'assorbimento e all'emissione di *interi* fotoni da parte della materia.

Osservazione *[]È opportuno soffermarsi un attimo sugli aspetti quantitativi della questione: una lampadina emette luce incoerente e non monocromatica, ma possiamo lo stesso stimare facilmente il numero* N *di fotoni emessi per secondo, supponendo che siano tutti emessi uniformemente nel visibile. Data la piccolezza della costante di Planck si trova che 100 Watt corrispondono a circa* 10^{20} *fotoni al secondo ad una frequenza di* 7×10^{14} Hz.

5.1.2. Effetto fotoelettrico. Questo effetto fornisce una conferma assai stringente dell'ipotesi "quantistica" per la radiazione elettromagnetica. Gli esperimenti relativi erano ben noti ancor prima del lavoro di Planck. Essi stabilivano con grande precisione le seguenti leggi empiriche sull'emissione di raggi catodici (cioè di elettroni) da parte di una lastra metallica illuminata:

a) Il numero di elettroni emessi è proporzionale all'intensità della radiazione incidente.

b) Esiste una frequenza di soglia ν_0, propria del metallo in esame, sotto la quale non vi è alcuna emissione.

c) La massima energia cinetica di un dato elettrone emesso è proporzionale alla differenza $\nu - \nu_0$ e *non dipende affatto* dall'intensità della radiazione incidente.

I risultati (b) e (c) non sono spiegabili classicamente. Al contrario, l'interpretazione fornita da Einstein[3], che si basa sull'idea dei fotoni, è assai semplice: la radiazione incidente, che assumiamo monocromatica, è composta da fotoni identici, tutti con energia $h\nu$; un fotone incidente viene assorbito (*per intero*!) da un elettrone che si trova legato nel metallo in uno stato di energia negativa $-V_0$ (V_0 è detto anche *potenziale di estrazione* e dipende sia dal metallo che dallo stato dell'elettrone). L'energia

[3]Per questo risultato Einstein fu insignito del premio Nobel nel 1922. Si veda [**Pai95**] per i retroscena di questo riconoscimento piuttosto tardivo.

dell'elettrone diventa $h\nu - V_0$, e se questa risulta positiva l'elettrone viene emesso. Per maggiori informazioni su questo argomento si veda ad esempio [**Per36, Bor62**].

5.1.3. Diffusione Compton. La diffusione della luce da elettroni liberi mostra un altro punto di conflitto tra l'esperimento e la teoria elettromagnetica classica. Il fenomeno, messo in luce per la prima volta da A. H. Compton nel 1920, consiste nel fatto che raggi-X diffusi da elettroni mostrano una variazione di frequenza dipendente dall'angolo di diffusione. Secondo la teoria classica l'onda diffusa deve avere la stessa frequenza dell'onda da cui origina, trattandosi in sostanza di un fenomeno di oscillazioni forzate. L'effetto, noto come *effetto Compton* è invece del tutto comprensibile alla luce della teoria quantistica. Secondo quest'ultima l'onda luminosa è costituita da un grande numero di fotoni, aventi energia $E_\gamma = h\nu$ e il cui momento lineare $\mathbf{q}$ soddisfa alla relazione di dispersione propria delle onde elettromagnetiche nel vuoto[4], cioè $|\mathbf{q}| = q_0 \equiv E_\gamma/c$. Nel formalismo relativistico, energia e impulso formano un quadrivettore $(\mathbf{q}, q_0)$ covariante e la condizione precedente equivale all'affermazione che il quadrivettore che rappresenta il momento lineare del fotone ha lunghezza nulla (si dice che q_μ sta *sul cono di luce*), intendendo ovviamente la lunghezza propria dello spazio di Minkowski $q^2 \equiv q_0^2 - |\mathbf{q}|^2$. Per una particella materiale come l'elettrone si avrà $p^2 \equiv p_0^2 - |\mathbf{p}|^2 = (E/c)^2 - |\mathbf{p}|^2 = m^2c^2$, dove m è la **massa a riposo** della particella. Ora, se consideriamo un urto elastico tra un elettrone e un fotone, potremo imporre la conservazione del quadrimomento e ottenere

$$\begin{aligned} q_0 + p_0 &= q_0' + p_0' \\ \mathbf{q} + \mathbf{p} &= \mathbf{q}' + \mathbf{p}' \,. \end{aligned}$$

Assumendo l'elettrone in quiete prima dell'urto, si ha $\mathbf{p}' = \mathbf{q} - \mathbf{q}'$ e quindi

$$q_0 + mc^2 = q_0' + c\sqrt{m^2c^2 + (\mathbf{q} - \mathbf{q}')^2}$$

da cui segue facilmente

$$mc^2(q_0 - q_0') = q_0 q_0' (1 - \cos\theta) \,,$$

essendo θ l'angolo formato da $\mathbf{q}$ e $\mathbf{q}'$. Tenendo conto della relazione di Einstein che lega energia e frequenza, si trova

$$\boxed{\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta)}$$

[4] Il valore del momento lineare per i fotoni è in accordo con il valore della pressione di radiazione prevista dalla teoria elettromagnetica classica.

che corrisponde perfettamente a quanto osservato. Il rapporto h/mc è noto come **lunghezza d'onda Compton** dell'elettrone.

In definitiva, la novità essenziale che viene alla luce con la legge di Planck, con l'effetto Compton e con l'effetto fotoelettrico consiste nel fatto che il campo di radiazione elettromagnetica, che si manifesta ordinariamente sotto forma di onde elettromagnetiche descritte dalle equazioni di Maxwell, può in altre circostanze comportarsi invece come un gas di particelle che obbediscono alla cinematica relativistica. Tra le grandezze particellari proprie di un singolo fotone e le grandezze ondulatorie sussiste il legame di Einstein:

$$E_\gamma = h\nu\,, \quad q = h\nu/c = h/\lambda\,. \tag{5.4}$$

Nel seguito vedremo come questo duplice aspetto della radiazione, che richiede un ripensamento radicale dell'elettrodinamica, si debba estendere alle particelle materiali, di modo che il quadro complessivo risulta, se non immediatamente coerente, almeno più simmetrico. La descrizione consistente del campo elettromagnetico quantizzato (QED: *Quantum ElectroDynamics*) richiede gli strumenti della seconda quantizzazione (cui si darà un cenno nel §12.3) ed è affrontato nei corsi superiori di fisica teorica [**Sch64, BD64, IZ80, Wei95**]. Per gli elementi di dinamica relativistica si vedano [**LL60, Pau58**].

5.1.4. Gli stati di polarizzazione del fotone. Un aspetto che risulta opportuno approfondire già in questa sede concerne l'interpretazione secondo la teoria dei quanti degli stati di polarizzazione della radiazione elettromagnetica. Ricordiamo allora che un'onda elettromagnetica monocromatica è caratterizzata, oltre che da un numero d'onda $\mathbf{k}$ e dalla relativa pulsazione $\omega = 2\pi\nu = c|\mathbf{k}|$, anche da un vettore di polarizzazione $\boldsymbol{\varepsilon}$, il quale descrive in che modo e con quale ampiezza il campo elettrico ed il campo magnetico oscillano nelle due direzioni ortogonali alla direzione di propagazione fissata dal versore $\hat{\mathbf{k}} = c\mathbf{k}/\omega$. In particolare il vettore del campo elettrico si scrive

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \mathfrak{Re}\,\left(\boldsymbol{\varepsilon}\exp\{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\omega t\}\right)\,,$$

dove $\boldsymbol{\varepsilon}$ è complesso e ortogonale a $\mathbf{k}$. Allora l'intensità della radiazione è proporzionale a $|\boldsymbol{\varepsilon}|^2 = \overline{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}$, mentre le fasi di $\boldsymbol{\varepsilon}$ determinano la traiettoria della punta del vettore $\mathbf{E}$ nel piano ortogonale a $\hat{\mathbf{k}}$. Fissando una direzione $\mathbf{n}$ in questo piano, possiamo porre

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon_1\mathbf{n} + \varepsilon_2\hat{\mathbf{k}}\wedge\mathbf{n}$$

dove le componenti ε_1 e ε_2 si possono scrivere

$$\varepsilon_1 = |\boldsymbol{\varepsilon}|\cos\alpha\, e^{-i\phi_1}\,, \quad \varepsilon_2 = |\boldsymbol{\varepsilon}|\sin\alpha\, e^{-i\phi_2}\,. \tag{5.5}$$

Quindi abbiamo

$$\mathbf{E}(\mathbf{x},t) = |\varepsilon|\left[\mathbf{n}\cos\alpha\,\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t-\phi_1) + \hat{\mathbf{k}}\wedge\mathbf{n}\,\sin\alpha\,\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t-\phi_2)\right],$$

per cui, in ogni punto del raggio, al variare di t il vettore $\mathbf{E}(t)$ descrive un'ellisse nel piano ortogonale alla direzione di propagazione. Si dice allora che la polarizzazione è **ellittica**. Nel caso particolare in cui $\phi_1 = \phi_2$, l'ellisse degenera in un segmento di retta e si parla di polarizzazione **lineare**. Ci poniamo ora il problema di interpretare ε dal punto di vista dei fotoni che compongono l'onda elettromagnetica. Il modulo quadro $|\varepsilon|^2$ è collegato, attraverso l'intensità della radiazione, al *numero medio* di fotoni. D'altra parte, possiamo individuare nel vettore complesso normalizzato $\varepsilon/|\varepsilon|$ una grandezza fisica propria di ogni singolo fotone. Si tratta della stessa grandezza per tutti i fotoni qualora la radiazione, oltre che polarizzata, sia anche *coerente*, mentre essa varia da fotone a fotone, ma soltanto per quanto riguarda la fase complessiva, nel caso di luce polarizzata *incoerente*. Il significato della polarizzazione di un singolo fotone appare evidente dagli esperimenti con i filtri polarizzatori.

Un **filtro polarizzatore** (lineare) è un dispositivo ottico capace di lasciar passare solo la luce polarizzata linearmente in una particolare direzione, detta *asse del polarizzatore*, che tipicamente coincide con la direzione lungo la quale sono orientati certi microcristalli che compongono il filtro stesso. In generale un polarizzatore non è perfettamente efficiente. Tuttavia, nelle prossime considerazioni l'eventuale parziale inefficienza di un certo filtro polarizzatore $\mathcal{P}$ non è significativa, per cui possiamo fin d'ora assumere che $\mathcal{P}$ lasci passare tutta la luce polarizzata linearmente lungo il proprio asse, che siamo liberi di identificare con $\mathbf{n}$, e che assorba completamente tutta la luce polarizzata nella direzione ortogonale a $\mathbf{n}$ (si intende che il raggio luminoso in questione incide verticalmente su $\mathcal{P}$). Inoltre, in un buon filtro polarizzatore e per fasci luminosi non troppo intensi, il campo elettromagnetico soddisfa ancora alle equazioni lineari di Maxwell proprie dei mezzi continui. La linearità di tali equazioni ci permette di considerare l'azione di $\mathcal{P}$ *separatamente* sulle due componenti di $\mathbf{E}$, cioè quella parallela a $\mathbf{n}$, $\mathbf{E}_1 = (\mathbf{E}\cdot\mathbf{n})\mathbf{n}$, e quella ortogonale ad esso, $\mathbf{E}_2 = \mathbf{E} - \mathbf{E}_1$. Quindi la componente parallela $\mathbf{E}_1$ passa indenne il filtro, mentre $\mathbf{E}_2$ viene interamente assorbita. Di conseguenza, in un punto al di là di $\mathcal{P}$ il campo elettrico vale

$$\mathbf{E}(\theta) = \mathbf{E}_1\cos\omega t\,,$$

ed è polarizzato lungo $\mathbf{n}$. Essendo l'intensità della radiazione luminosa proporzionale al modulo quadro del vettore elettrico, il fascio polarizzato che emerge da $\mathcal{P}$ ha un'intensità ridotta rispetto al fascio incidente di un

fattore

$$\frac{|\mathbf{E}_1|^2}{|\mathbf{E}_1|^2 + |\mathbf{E}_2|^2} = \frac{|\mathbf{E}_1|^2}{E_0^2} = \cos^2\alpha\,, \tag{5.6}$$

essendo α l'angolo formato dalla direzione di polarizzazione del raggio incidente con l'asse del polarizzatore $\mathbf{n}$.

Secondo la descrizione quantomeccanica il raggio luminoso monocromatico è costituito da fotoni identici, tutti con energia $h\nu$ e con vettore di polarizzazione $\boldsymbol{\varepsilon}$[5]. L'intensità del raggio è proporzionale al numero medio di fotoni. Nell'attraversamento del filtro polarizzatore un certo numero di fotoni viene assorbito, provocando una diminuzione dell'intensità luminosa. Dalla relazione (5.6) deduciamo quindi che una frazione pari a $\sin^2\alpha$ di fotoni viene assorbita, mentre una frazione $\cos^2\alpha$ passa indenne. Non solo, tutti i fotoni che passano devono essere polarizzati lungo $\mathbf{n}$.

Questa descrizione si applica anche per intensità incidenti così basse da obbligarci a considerare che ciascun fotone del raggio interagisca con il materiale del filtro $\mathcal{P}$ *indipendentemente* dagli altri fotoni. Quindi ciascun fotone o passa attraverso $\mathcal{P}$ o viene assorbito da esso (un quanto è per ipotesi indivisibile). E se passa, una volta passato è senz'altro polarizzato lungo $\mathbf{n}$. Questa affermazione è perfettamente verificabile ponendo dopo $\mathcal{P}$ un altro filtro polarizzatore $\mathcal{P}'$ uguale a $\mathcal{P}$ e ugualmente orientato. La luce lo attraversa senza alcuna riduzione di intensità, ovvero ciascun fotone *certamente* attraversa indenne $\mathcal{P}'$.

Mediante il vettore di polarizzazione $\boldsymbol{\varepsilon}$ possiamo descrivere l'esperimento con il filtro polarizzatore $\mathcal{P}$ nel seguente modo: il rapporto $|\varepsilon_1|^2/|\boldsymbol{\varepsilon}|^2$, che vale esattamente $\cos^2\alpha$, rappresenta la *probabilità* che il fotone attraversi $\mathcal{P}$. Per un singolo fotone non possiamo fare alcuna previsione certa sull'esito dell'esperimento. Immaginando che i fotoni incidano su $\mathcal{P}$ uno alla volta, se α è diverso da 0 e da $\pi/2$ un rivelatore posto al di là di $\mathcal{P}$ a volte "scatta" e a volte no. D'altra parte, per un grande numero di fotoni possiamo verificare la correttezza della nostra interpretazione: tenendo conto che i fotoni del raggio incidente sono tutti identici, se $\cos^2\alpha$ è la probabilità che ciascun fotone passi e l'evento che effettivamente si verifica non influenza in alcun modo gli altri fotoni, allora il numero di fotoni che passano, e con esso l'intensità della radiazione emergente, sarà mediamente proporzionale a $\cos^2\alpha$.

Dunque un fotone, con numero d'onda $\mathbf{k}$ fissato, possiede ulteriori gradi di libertà descritti dal vettore di polarizzazione $\boldsymbol{\varepsilon}$, che è ortogonale a $\mathbf{k}$ ed assume valori generalmente complessi. Il modulo quadro $|\boldsymbol{\varepsilon}|^2$ non rappresenta una caratteristica di singolo fotone, fornendo piuttosto una

[5] Si usa ormai molto più comunemente $E = \hbar\omega$, dove $\hbar \equiv h/2\pi$ è la costante di Planck ridotta.

misura del numero di fotoni di un certo tipo presenti. Il tipo di fotoni dipende dal vettore normalizzato $\boldsymbol{\varepsilon}/|\boldsymbol{\varepsilon}|$.

Neppure la fase complessiva di $\boldsymbol{\varepsilon}$ ha un significato fisico per il singolo fotone. Infatti, per una collezione di N fotoni identici, essa determina soltanto la fase dell'oscillazione del campo elettrico (cioè l'istante di tempo nel quale la punta del vettore elettrico $\mathbf{E}$ passa attraverso un determinato punto dell'ellisse di polarizzazione). Si verifica sperimentalmente che più è bassa l'intensità della radiazione, più difficile è la misurazione del campo elettrico in un dato punto spazio-temporale e quindi più indeterminata è la sua fase. In altri termini esiste un **principio di indeterminazione** tra la fase della radiazione luminosa ed il numero di fotoni che essa contiene, ovvero la sua intensità. Dunque nel caso di un singolo fotone l'indeterminazione sulla fase del campo elettromagnetico è massima, rendendo fisicamente irrilevante la fase complessiva di $\boldsymbol{\varepsilon}$.

Gli stati di polarizzazione di un singolo fotone sono quindi descritti da vettori bidimensionali complessi, normalizzati ed identificati qualora differiscano solo per un fattore di fase complessivo. Si tratta di due gradi di libertà reali. Di questi uno, e cioè il modulo quadro di una delle due componenti ε_1 e ε_2, risulta misurabile direttamente mediante l'esperimento con il filtro polarizzatore descritto sopra. L'altro grado di libertà è la fase relativa tra ε_1 e ε_2, in pratica $\phi_1 - \phi_2$ (vedi Eq. (5.5)). Essa determina la forma dell'ellisse di polarizzazione ed è misurabile mediante esperimenti di interferenza ottica con altri fasci di polarizzazione nota.

Al giorno d'oggi è possibile effettuare esperimenti raffinatissimi sui fotoni, sfruttando la grande coerenza e monocromaticità dei *raggi laser*. Un esempio di tal genere è illustrato, dal punto di vista teorico, nell'App. A.3.

5.1.5. La teoria di Bohr. La meccanica di Newton-Lagrange-Hamilton si rivela inadeguata a descrivere la fisica dell'atomo. All'inizio di questo secolo, l'imponente mole di dati sperimentali riguardante gli spettri di emissione e di assorbimento dei vari elementi da sola sembra imporre la necessità di un superamento della fisica classica. In particolare la natura degli **spettri a righe** degli elementi allo stato gassoso pone interrogativi che sembrano irrisolubili nell'ambito della visione classica della natura. Con questo non si vuole implicare che la teoria classica fallisca su tutti i problemi fisici alla scala atomica, ma che essa, nell'ottica di Einstein ricordata nell'introduzione, non sia di fatto in grado di fornire una descrizione unificata e consistente per tutti i fenomeni osservati. Si tratterebbe ad esempio di giustificare uno stato di equilibrio dinamico tra particelle cariche (i costituenti dell'atomo) che nessun modello basato sulla elettrodinamica riesce a riprodurre; cariche in interazione elettromagnetica in moto quasiperiodico intorno al loro centro di massa sono soggette infatti

a continue accelerazioni e in base alla elettrodinamica devono irraggiare energia sotto forma di onde elettromagnetiche. Ciò è in palese contrasto con l'esistenza stessa di atomi stabili. Si noti tuttavia che non esiste un soluzione esatta neanche per il problema di *due* cariche in mutua interazione elettromagnetica, se si tengono in considerazione tutti i gradi di libertà del campo; quindi potrebbe restare aperta la possibilità che effetti ancora non compresi nel comportamento di cariche in moto accelerato possano portare a orbite stabili senza irraggiamento. Resta il fatto che la fisica classica, *nell'ambito delle approssimazioni praticabili*, non riesce a rendere conto dell'esistenza di stati stazionari per sistemi di particelle cariche (si veda l'ampia trattazione su [**LL60, Jac75**]).[6] Illustriamo ora rapidamente il tentativo effettuato da **Bohr** di aggirare questa difficoltà. Bohr assume il modello di atomo introdotto da Rutherford, secondo cui l'atomo è costituito da un nucleo positivo in cui è concentrata la maggior parte della massa, e da elettroni legati al nucleo dalla forza di attrazione elettrostatica, un modello simile a quello del sistema solare. L'ipotesi di Bohr consiste nell'assumere che vi sia a livello atomico una regola di selezione che permette alle particelle di seguire solo alcune determinate traiettorie tra tutte quelle previste dalla meccanica classica; la regola di selezione scoperta da Bohr è formulata in termini delle **variabili d'azione** che abbiamo considerato al §3.1.1 e precisamente si assume che
a) *le uniche traiettorie permesse siano quelle che corrispondono a valori interi delle variabili d'azione in unità della costante di Planck, ovvero*

$$\boxed{J_i = \oint p_i \, dq_i = n_i h \,, \quad (i = 1, \ldots, n)}$$

[6]Esiste un argomento di "naturalezza" secondo cui la meccanica classica non può giustificare la struttura stabile deli atomi: qualunque sia il meccanismo dettagliato che per qualche effetto sconosciuto portasse ad es. due cariche opposte a orbitare stabilmente solo su valori di energia discreti E_n, sarebbe necessario individuare questi livelli esclusivamente sulla base delle costanti fondamentali disponibili, e cioè *masse, carica elettrica e velocità della luce*. Ebbene l'unica combinazione di queste ultime con dimensione corretta risulta mc^2, ma questa scala di energia, oltre a non dipendere dalla carica, il che è quanto meno sospetto, risulta molti ordini di grandezza superiore ($O(MeV)$= milioni di eV) alla scala delle energie di legame atomiche ($O(eV)$). D'altro canto l'energia di ionizzazione dell'Elio ionizzato, con carica doppia di quela dell'idrogeno, risulta circa quattro volte superiore all'energia di ionizzazione dell'idrogeno, il che implica che la carica elettrica ha un ruolo importante nel determinare i livelli di energia, e questo contrasta con quanto detto prima. Analogamente si trova che l'unica scala di lunghezze disponibile in meccanica classica è data da e^2/mc^2 che risulta circa 20000 volte troppo piccola rispetto alle dimensioni atomiche. Naturalmente la nuova fisica quantistica, avendo a disposizione una nuova costante fondamentale avente le dimensioni di Energia×Tempo non è vincolata come la Fisica Classica da argomenti dimensionali - si veda a pag.78.

b) *gli elettroni possono rimanere stabilmente sulle orbite permesse senza irraggiare, oppure effettuare un salto ad un'altra traiettoria permessa emettendo (o assorbendo) un quanto di radiazione con frequenza* $\nu_{if} = (E_i - E_f)/h$ (avendo indicato con E_i l'energia dell'orbita iniziale e con E_f quella finale).

La selezione di orbite con valori interi di J/h viene chiamata **quantizzazione** dei livelli energetici. Non vi sono condizioni specifiche per quelle traiettorie a energia positiva che corrispondono a moti aperiodici. Lo schema di Bohr è giustificato solo a posteriori dal successo che incontra nel prevedere lo spettro di emissione dell'atomo di idrogeno, ma è palesemente inadeguato da un punto di vista teorico. Appare molto restrittiva la limitazione connessa alla separabilità del moto classico, unico caso in cui si possono definire le variabili d'azione[7]. Esiste in effetti una base intuitiva alla condizione di quantizzazione, suggerita da **Ehrenfest** nel 1914 (si veda [**Bor62**]). Secondo questo punto di vista, se ci devono essere grandezze quantizzate che subiscono variazioni discontinue solo sotto l'azione di forze impulsive, quali l'urto tra due atomi o tra un atomo e un fotone, tali grandezze devono avere la proprietà di *rimanere costanti del moto sotto variazioni molto lente dei parametri del sistema* e questo restringe la scelta agli *invarianti adiabatici*. Secondo questo principio perciò le condizioni di Bohr sono del tutto naturali. Non è tuttavia possibile sanare in questo modo il contrasto con l'elettrodinamica.

La teoria di Bohr è nota come "vecchia teoria dei quanti" ed è completamente superata dalla nuova meccanica quantistica, di cui costituisce un'approssimazione in regime "quasi-classico" (vedi il §10.2). Per una trattazione adeguata della spettroscopia atomica rimandiamo al corso di Struttura della Materia [**FR95**]. Per tutta la "vecchia" teoria dei quanti vedere il testo [**Bor62**] che è stato studiato da intere generazioni di fisici e conserva ancor oggi tutto il suo valore.

PROBLEMA 5.1-1 []Determinare i livelli energetici permessi dalla condizione di quantizzazione di Bohr nel caso dell'atomo di idrogeno.

SOLUZIONE *[]Dalla Eq.* (3.4) *ricaviamo la dipendenza dell'energia dalle variabili d'azione e perciò, ponendo* $\hbar = h/2\pi$ *e* $k = e^2$ *troviamo*

$$\boxed{E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}} \tag{5.7}$$

[7] In realtà questa è una limitazione pratica, più che di principio; in effetti è possibile applicare con successo le condizioni di quantizzazione a sistemi non separabili imponendo la condizione di Bohr direttamente sulle orbite periodiche che esistono in generale in numero pari al numero di gradi di libertà secondo un teorema di Weinstein [**Wei73**]; ciò è tuttavia praticabile solo con l'analisi numerica e non era proponibile ai tempi di Bohr.

dove il numero intero positivo n *rappresenta la somma dei tre numeri quantici* $n_r, n_\vartheta, n_\varphi$ *(indichiamo con* m *la massa dell'elettrone, sorvolando sul fatto che in questa formula dovremmo per maggiore precisione inserire la massa ridotta). Le* **frequenze di Bohr** $\nu_{nn'} = (E_n - E_{n'})/h$ *sono allora date dalla formula di Balmer*

$$\nu_{nn'} = cR_\infty \left(n'^{-2} - n^{-2}\right) ,$$

dove R_∞ *è nota come* **costante di Rydberg** *ed ha le dimensioni dell'inverso di una lunghezza (*$R_\infty^{-1} \approx 10^3 \mathring{A}$*), ed è legata all'energia di ionizzazione dell'idrogeno, cioè*

$$-E_1 = hcR_\infty \approx 13.605\text{eV} .$$

Dal legame tra energia e raggio dell'orbita si ha poi che quest'ultimo è dato da

$$a_n = n^2 \frac{h^2}{me^2} .$$

La scala di lunghezza naturale è perciò il **raggio di Bohr** $a = h^2/me^2 \approx 0.529 \mathring{A}$.

PROBLEMA 5.1-2 []Quali combinazioni di costanti fondamentali $e, c, \hbar, m$ hanno la dimensione di una lunghezza, e quali la dimensione di un'energia?

SOLUZIONE *[]C'è innanzitutto da osservare che la combinazione* $\alpha = e^2/(\hbar c) \approx 1/137$ *è adimensionale (vedi il §13.3), e quindi possiamo costruire una lunghezza usando solo tre delle quattro costanti. Si trova facilmente che se escludiamo* $\hbar$ *l'unica possibilità è data da*

$$\rho = \frac{e^2}{mc^2} \approx 2.818\,10^{-15}\text{m} = 2.818 \text{ fm} ,$$

che rappresenta la distanza alla quale l'energia elettrostatica tra due elettroni coincide con mc^2*; si trovano poi, dividendo successivamente per* α*, la lunghezza di Compton ed il raggio di Bohr*

$$\lambda = \rho/\alpha = \frac{\hbar}{mc} \approx 3.861\,10^{-13}\text{m}$$
$$a = \rho/\alpha^2 = \frac{\hbar^2}{me^2} .$$

Come si vede l'unità naturale di lunghezza alla scala atomica è quattro ordini di grandezza più grande *dell'unità che si può costruire senza fare uso della costante di Planck. Quanto all'energia, dato che* e^2/ℓ *è un'energia se* ℓ *è una lunghezza, da ogni scala di lunghezze si ottiene subito una scala di energie: ad es.* $e^2/a = m\,e^4/\hbar^2$ *nel caso del raggio di Bohr, ed è l'unica combinazione avente la dimensione di lunghezza che non dipende da* c.

PROBLEMA 5.1-3 []Secondo il **principio di Pauli** in un atomo a molti elettroni due elettroni non possono condividere lo stesso livello quantico. Qual è il raggio dell'orbita più esterna per un atomo con numero atomico Z?

SOLUZIONE *[]Al numero quantico* n *corrispondono* n^2 *orbite stabili, che sono date dalle partizioni possibili* $n = n_r + l + 1$*, con* $n_r \geq 0$ *e quindi* $l = n_\varphi + n_\vartheta < n$*; ad ogni valore di* l *corrispondono poi* $2l+1$ *valori della costante del moto* $p_\varphi = \hbar n_\varphi$*; ciò implica che il numero totale di stati disponibili cresce come* $2n^3/3$*, tenendo conto del raddoppiamento di stati che si ha ammettendo che l'elettrone abbia un momento angolare intrinseco (l'ipotesi di* **Goudsmit** *e* **Uhlenbeck***). Quindi per un atomo di numero atomico* Z *l'elettrone più esterno avrà numero quantico* $n \gtrsim (3Z/2)^{1/3}$ *Il raggio* a_Z *dell'atomo sarà dato dalla relazione* $E = -Ze^2/2a_Z = -mZ^2e^4/2\hbar^2n^2$ *ossia* $a_Z = \hbar^2n^2/me^2Z \propto Z^{-1/3}$*. Questa previsione non tiene conto della repulsione elettrostatica tra gli elettroni, che essenzialmente tende a schermare la carica del nucleo e infatti si trovano sperimentalmente dimensioni crescenti con il numero atomico (da 0.5Å a 2.5Å, si veda ad es.*[**FR95**]*).*

Osservazione *[]Le condizioni di quantizzazione di Bohr equivalgono al principio secondo cui ogni stato permesso occupa una cella di volume* h^n *nello spazio delle fasi. Nel caso separabile possiamo ragionare in ogni sottospazio di coppie canoniche* (p, q)*. La condizione* $J = nh$ *ci dice che l'area della porzione di piano* A *che ha per contorno la proiezione dell'orbita ha area multipla intera di* h*, come discende dalla formula integrale di Gauss*

$$\int_A dp\, dq = \oint_{\partial A} p\, dq\,.$$

In meccanica quantistica questo risultato si esprime nel principio di Heisenberg*, secondo cui la misura simultanea di posizione e momento lineare è soggetta ad una limitazione intrinseca di precisione: il prodotto* $\Delta q\, \Delta p$ *non può essere inferiore a* $\frac{1}{2}\hbar$ *(vedi il §7.3.3).*

Notiamo che la condizione di quantizzazione per J_φ implica che la componente del momento angolare in direzione z che si identifica con la costante del moto $p_\varphi = J_\varphi/2\pi$ può assumere soltanto valori interi in unità $\hbar$. Per la simmetria di rotazione si sarebbe indotti a concludere che la componente del momento angolare in *qualunque direzione* deve essere quantizzata allo stesso modo, il che risulta palesemente impossibile da realizzarsi. Dunque o si ha una rottura di simmetria di rotazione o la quantizzazione alla Bohr deve essere modificata. Vedremo che la meccanica quantistica dà una soluzione del tutto originale al problema (vedi il cap. 8).

5.1.6. L'esperimento di Stern-Gerlach. La necessità di spiegare teoricamente la quantizzazione del momento angolare in qualunque direzione viene imposta, più che dal tentativo di Bohr appena illustrato, dai risultati dal famoso ed ormai paradigmatico esperimento di Stern-Gerlach. Un fascio di atomi dotati di momento magnetico $\boldsymbol{\mu}$ viene fatto passare nella regione di spazio in cui due magneti di forma opportuna

determinano un campo magnetico $\mathbf{B}$ non uniforme. Gli atomi si muovano originariamente nella direzione x, mentre $\mathbf{B}$ è diretto lungo z e praticamente costante nel piano xy. Esso varia invece in direzione z. Essendo $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$ l'energia potenziale di accoppiamento, ogni atomo è soggetto alla forza

$$\mathbf{F} = -\nabla(-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \boldsymbol{e}_z \,. \tag{5.8}$$

Se assumiamo come naturale che $\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$ sia l'unico termine della Hamiltoniana che rompe la simmetria rotazionale, abbiamo che la componente μ_z del momento magnetico è una costante del moto, per cui atomi con diverso μ_z sono soggetti a forze diverse e vengono separati nella direzione z. In un modello atomico fatto di elettroni orbitanti in modo definito attorno ad un nucleo molto più pesante, il momento magnetico è proporzionale al momento angolare $\mathbf{J}$ del sistema elettronico rispetto al nucleo stesso. In un fascio di atomi uguali questi momenti saranno distribuiti in un certo modo, che dipende da come il fascio stesso è stato preparato. In assenza di ragioni per il contrario, è naturale assumere una distribuzione più o meno isotropica, per cui il fascio iniziale, per ipotesi ben collimato, dovrebbe "aprirsi" in modo più o meno uniforme.

Il risultato tipico che si osserva è la separazione del fascio in un numero finito, generalmente piccolo, di sottofasci equispaziati ed ancora ben collimati. Questo vuol dire che J_z assume solo un numero discreto di valori equidistanti negli atomi del fascio iniziale. La cosa sorprendente è che questo avviene per ogni scelta dell'asse z nel piano ortogonale alla direzione originaria del fascio, cioè per ogni orientazione dei magneti in quel piano.

Supponiamo ora di utilizzare questo esperimento per "filtrare" gli atomi del fascio, decidendo di utilizzare per un esperimento successivo solo uno dei sottofasci in cui è stato separato, diciamo quello corrispondente al valore di J_z più grande. Sembrerebbe naturale assumere che tutti gli atomi del nuovo fascio abbiano lo stesso ben definito valore di J_z e quindi di μ_z, per cui dovrebbero comportarsi nello stesso modo attraversando una seconda coppia di magneti di Stern-Gerlach. Si trova che questo è vero solo se i nuovi magneti sono orientati come i precedenti. Se invece essi sono ruotati, ad esempio ad angolo retto, rispetto ai precedenti, lo stesso fenomeno del primo esperimento si ripete: anche il nuovo fascio si suddivide nello stesso numero di sottofasci ben collimati.

Le lezioni che si traggono sono due:

a) Il fenomemo sembra riguardare i singoli atomi, nel senso che il comportamento di un dato atomo con un J_z fissato non è univocamente determinato.

b) Il momento angolare degli elettroni rispetto ad un asse arbitrario può assumere solo un numero discreto di valori.
Ritorneremo in seguito sull'esperimento di Stern-Gerlach alla luce della teoria quantistica del momento angolare.

5.2. L'equazione di Schroedinger

5.2.1. Onde materiali. L'idea centrale che sta alla base della meccanica ondulatoria origina dalla tesi di **De Broglie** secondo cui ad ogni particella materiale è associata un'onda la cui lunghezza d'onda λ è legata al momento lineare dalla relazione Track 1

$$\lambda = \frac{h}{p} .$$

L'idea permette di unificare la trattazione della radiazione secondo la teoria dei quanti sviluppata da Einstein con la dinamica delle particelle materiali. Per i quanti di luce vale infatti la relazione 5.4 a p. 72 da cui segue, secondo la relazione relativistica per il fotone $E = pc$ e il legame tra lunghezza d'onda e frequenza, la stessa relazione di De Broglie. L'ipotesi è perciò che la stessa dualità onda corpuscolo che si manifesta nella luce (i fotoni si comportano come onde nei fenomeni di diffrazione e interferenza e come particelle nell'effetto fotoelettrico e nell'effetto Compton) sia più generale e si applichi anche alle particelle materiali. Consideriamo l'ordine di grandezza della lunghezza d'onda di un elettrone avente giusto l'energia di legame dell'atomo di idrogeno:

$$\lambda/2\pi = \frac{\hbar}{\sqrt{2m|E|}} = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

che coincide con il *raggio di Bohr*. Come si vede l'ordine di grandezza è quello giusto, il che ci conferma di essere nella direzione corretta. Per elettroni *non relativistici*, ossia con energia molto piccola rispetto a $\frac{1}{2}$ MeV, la formula di De Broglie si può scrivere

$$\lambda \approx \frac{12.3\text{Å}}{\sqrt{E/E_0}} , \quad E_0 = 1\, eV \tag{5.9}$$

Si noti che la relazione $\lambda = h/p$ ha invece validità anche per elettroni a energia paragonabile a mc^2, ossia elettroni relativistici. Esperimenti condotti nel 1927 da **Davisson** e **Germer** mostrano chiaramente che gli elettroni subiscono diffrazione esattamente come previsto dall'ipotesi di De Broglie (che risale al 1924). Si apre con questi esperimenti una branca della fisica (l'ottica elettronica) che costituisce ancora oggi (insieme con l'ottica neutronica e con l'ottica a luce coerente) un fondamentale strumento per l'indagine della struttura della materia. Se un pennello

elettronico viene fatto incidere su di uno schermo con due fenditure separate da una distanza d dello stesso ordine di grandezza della lunghezza d'onda di De Broglie, e va poi a impressionare una lastra fotografica posta dietro lo schermo, quello che si osserva è del tutto analogo alle figure di interferenza che si osservano con luce monocromatica. La distanza tra le frange di diffrazione, nota l'energia del fascio elettronico, permette di verificare la relazione di De Broglie. Si noti che questa proprietà degli elettroni è in netto contrasto con il modello corpuscolare. Ipotizziamo infatti che la diffrazione elettronica sia dovuta a qualche perturbazione della traiettoria dovuta all'urto contro i bordi delle fenditure, con conseguente variazione casuale della velocità: dovremmo allora aspettarci che la figura che viene a formarsi sulla lastra fotografica sia la stessa anche qualora lasciassimo aperta una sola fenditura per metà del tempo e la seconda fenditura per un tempo uguale. Si riscontra invece che in questo caso nella figura di diffrazione *non si osservano frange di interferenza*. La natura del fenomeno è perciò del tutto simile a quella dell'interferenza di onde luminose monocromatiche.

Quantunque la fisica classica ci renda intuitivo il concetto di onda, dobbiamo sottolineare che sia per i fotoni che per le particelle materiali il modello ondulatorio non può che contenere una parte della realtà fisica. L'apparente conflitto tra la natura corpuscolare e quella ondulatoria resta irrisolto nei lavori precedenti la meccanica quantistica, e secondo alcuni fisici costituisce una difficoltà anche per quest'ultima. Rimandiamo al cap. 7 per un accenno a questa problematica.

5.2.2. Pacchetti d'onda. Sviluppiamo ora gli strumenti matematici necessari per descrivere adeguatamente la propagazione di onde in un mezzo dispersivo e rendere quantitative le idee introdotte finora riguardo alle onde di De Broglie. Un qualunque fenomeno ondulatorio lineare è descrivibile in termini di una funzione d'onda ottenuta come sovrapposizione lineare di onde piane

$$\exp\{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\omega(\mathbf{k})\,t\}\,. \tag{5.10}$$

Il vettore d'onda $\mathbf{k}$ individua la direzione di propagazione dell'onda piana; i piani ortogonali ad esso sono piani di fase costante. La fase assume lo stesso valore sui piani che distano per multipli della quantità $\lambda = 2\pi/|\mathbf{k}|$, che viene perciò chiamata lunghezza d'onda. La quantità $v_f = \omega(\mathbf{k})/|\mathbf{k}|$ si dice *velocità di fase*. Il suo significato è molto semplice: se immaginassimo di spostarci in direzione $\mathbf{k}$ con velocità v_f osserveremmo una fase costante. La funzione $\omega(\mathbf{k})$ caratterizza la **dispersione** delle onde piane. Per le onde luminose in un mezzo omogeneo e isotropo di indice di rifrazione n indipendente dalla lunghezza d'onda si ha $\omega = c|\mathbf{k}|/n$, $v_f = c/n$, e quindi non si ha dispersione. Nel caso generale in cui ω sia una funzione non

lineare di $|\mathbf{k}|$, si osserva invece il fenomeno della dispersione, importante in ottica e, come vedremo, di fondamentale importanza per la meccanica ondulatoria.

È chiaro che le onde piane sono solo una idealizzazione matematica. Ogni onda reale avrà un'estensione finita nello spazio e dovrà perciò descriversi attraverso una sovrapposizione di onde piane: chiameremo *pacchetto d'onde* un'espressione del tipo

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int c(\mathbf{k}) \exp\{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\omega(\mathbf{k})t\}\, d^3k \tag{5.11}$$

dove l'ampiezza $c(\mathbf{k})$ sarà tipicamente una funzione concentrata intorno ad un valore medio $\langle\mathbf{k}\rangle = \mathbf{k}_0$. Le considerazioni che svilupperemo nel seguito non dipendono dai dettagli della funzione, ma è più economico lavorare su una funzione data in forma esplicita. Per fissare le idee consideriamo perciò una funzione gaussiana $c(\mathbf{k}) \sim \exp\{-(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0/\alpha^2)^2\}$.

Vogliamo mostrare che un pacchetto d'onda evolve nel tempo in modo tale che il suo centro si muove con una velocità v_g detta "velocità di gruppo" pari a $|\nabla_{\mathbf{k}}\omega(\mathbf{k})|$. Nella formula che definisce il pacchetto d'onda approssimiamo l'esponente con il suo sviluppo di Taylor intorno a $\mathbf{k}_0$. Conviene a questo scopo sostituire la variabile di integrazione $\mathbf{k}$ ponendo $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + \alpha\xi$. Otteniamo così :

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{x}) &\propto \int d^3\xi\, \exp\left\{-\xi^2 + i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{x} + i\alpha\boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{x} - i\omega(\mathbf{k}_0 + \alpha\boldsymbol{\xi})t\right\} \\ &\sim \exp\{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{x} - i\omega(\mathbf{k}_0)t\} \int d^3\xi\, \exp\left\{-\xi^2 + i\alpha\boldsymbol{\xi}\cdot\left(\mathbf{x} - \frac{\partial\omega}{\partial\mathbf{k}_0}t\right)\right\}.\end{aligned}$$

Come si vede il pacchetto d'onde si può approssimare con un'onda piana di vettore d'onda $\mathbf{k}_0$ modulata da una gaussiana centrata nel punto $\mathbf{x} = t\partial\omega/\partial\mathbf{k}_0$ il che è quanto volevamo dimostrare. Notiamo che la velocità di gruppo coincide con la velocità di fase solo nel caso in cui la frequenza dipenda linearmente dal vettore d'onda, mentre in generale non vi è relazione tra le due. In taluni casi si può anche avere $v_f > c$ (ma $v_g < c$) il che indica che la velocità di fase non è in generale osservabile (si veda il Probl. 5.2-4 a p. 91.) Quanto alla identificazione della velocità di gruppo con la velocità di propagazione del segnale portato dall'onda, la cosa non è così semplice (si veda [**Bri60**]); a noi interessa tuttavia il fatto che la velocità di gruppo descrive in modo preciso la velocità di propagazione del baricentro del pacchetto d'onde.

Torniamo ora all'idea di De Broglie che consiste nell'associare ad ogni particella elementare un'onda secondo la relazione $\lambda \sim h/mv$. Seguendo un argomento che risale a Fermi, chiediamoci in quale modo un pacchetto d'onda possa seguire una traiettoria che appaia ubbidire alla legge del moto di Newton nel limite di piccole lunghezze d'onda. Sappiamo che nel

caso di propagazione di onde luminose in questo limite si può applicare l'approssimazione dell'ottica geometrica che descrive la luce in termini di raggi soggetti al principio variazionale di Fermat (vedi il §1.3.2)

$$\delta \int \frac{ds}{v_f(\omega, x)} = 0 \tag{5.12}$$

La velocità di fase $v_f = c/n$ dipende in generale dalla frequenza (dispersione) e dalla posizione nello spazio (nel caso generale di un mezzo trasparente non omogeneo). Ci si deve chiedere allora in quali circostanze questo principio diventi equivalente a quello (di Maupertuis) che corrisponde alla meccanica classica

$$\delta \int \sqrt{E - V(x)}\, ds = 0 \tag{5.13}$$

A questo scopo sarà sufficiente richiedere che risulti

$$\frac{1}{v_f(\omega, x)} = f(\omega)\sqrt{E - V(x)}$$

per qualche funzione $f(\omega)$, da determinarsi; affinché l'uguaglianza valga in generale, e non soltanto per qualche valore particolare dell'energia, dovremo inoltre ammettere che esista un legame tra energia e frequenza, $E = E(\omega)$, anche questa da determinarsi. Richiederemo allora che la *velocità di gruppo* del pacchetto d'onda coincida con la velocità della particella v_p legata al valore dell'energia secondo la meccanica classica. Dalla definizione si trova

$$v_g^{-1} = \left|\frac{d\omega}{dk}\right|^{-1} = \frac{d}{d\omega}\left(\frac{\omega}{v_f}\right)$$

e perciò

$$\frac{d}{d\omega}\left(\omega f(\omega)\sqrt{E(\omega) - V(x)}\right) \equiv \frac{1}{v_g} = \frac{1}{v_p} \equiv \sqrt{\frac{m}{2}}\frac{1}{\sqrt{E(\omega) - V(x)}},$$

da cui segue

$$\left[f(\omega) + \omega f'(\omega)\right]\sqrt{E(\omega) - V(x)} + \frac{\omega f(\omega\, E'(\omega))}{2\sqrt{E(\omega) - V(x)}} = \frac{\sqrt{m/2}}{\sqrt{E(\omega) - V(x)}}$$

e infine

$$f(\omega) + \omega f'(\omega) = \frac{\sqrt{m/2} - \frac{1}{2}\omega f(\omega) E'(\omega)}{E(\omega) - V(x)}\,.$$

Derivando rispetto a x^i troviamo che ambo i membri dell'equazione devono annullarsi e perciò

$$\begin{aligned} f'(\omega)/f(\omega) &= -1/\omega \\ \omega f(\omega) E'(\omega) &= \sqrt{2m}\,. \end{aligned}$$

che si risolve facilmente nella forma

$$\begin{aligned} f(\omega) &= \frac{K}{\omega} \\ E(\omega) &= \frac{\sqrt{2m}}{K}\omega + E(0) \end{aligned}$$

A questo punto siamo in grado di esprimere anche la velocità di fase in termini delle grandezze meccaniche: risulta

$$v_f = \omega K\sqrt{E - V(x)} \to \lambda = \frac{2\pi\sqrt{2m}}{Kp} \tag{5.14}$$

essendo p il momento lineare. Questa non è altro che la relazione di De Broglie, sempre che si identifichi $K \equiv \sqrt{2m}/\hbar$; nel contempo otteniamo anche la relazione di Einstein $E = \hbar\omega + E(0)$. Questo argomento mostra che *la meccanica del punto materiale regolata dall'equazione di Newton è equivalente alla descrizione del moto in termini di un pacchetto d'onda che si propaga in un mezzo avente indice di rifrazione variabile da punto a punto se la velocità di fase è legata alla energia meccanica secondo la relazione di De Broglie.* Si noti che l'analogia tra ottica e meccanica, nei suoi aspetti formali, era già ben nota a Hamilton, ma le sue implicazioni fisiche sono maturate solo con le idee di De Broglie e Schroedinger e naturalmente con le osservazioni sperimentali delle proprietà ondulatorie delle particelle materiali.

5.2.3. L'equazione d'onda. La conclusione cui siamo giunti nelle pagine precedenti si può riformulare affermando che il vuoto si comporta per le onde di De Broglie come un mezzo dispersivo con indice di rifrazione pari a

$$n/c = 1v_f = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar\omega}\sqrt{\hbar\omega - V(x)}\,. \tag{5.15}$$

Se ricordiamo a questo punto che il principio di Fermat dell'ottica geometrica è ottenuto nel limite di piccole lunghezze d'onda dall'equazione di Helmholtz (vedi [**Tor53**])

$$\triangle u + k^2 u = 0, \quad k = \frac{\omega}{v_f}, \tag{5.16}$$

risulta del tutto naturale invocare un'equazione d'onda per le onde materiali nella forma

$$\triangle u + \frac{2m}{\hbar^2}\left(\hbar\omega - V(x)\right) u = 0 \tag{5.17}$$

che riscriviamo nella forma definitiva

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \triangle u + V(x)u = Eu} \tag{5.18}$$

che è nota come "equazione di Schroedinger per gli stati stazionari"[8]. L'equazione in questa forma contiene il parametro E legato alla frequenza; un'equazione che valga per un qualunque pacchetto d'onde si ottiene assumendo una dipendenza periodica dal tempo del tipo $\exp(-i\omega t)$, il che comporta

$$\omega u \sim i\frac{\partial u}{\partial t} \,. \tag{5.19}$$

Siamo così condotti all'**equazione di Schroedinger**

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle \psi(x,t) + V(x)\psi(x,t)} \tag{5.20}$$

Le due equazioni sono equivalenti per $\psi(x,t) = \exp(-iEt/\hbar)\,u(x)$. Ci si chiederà quale valore abbia l'argomento che ci ha condotto a ricavare la forma dell'equazione. Posto che le proprietà ondulatorie della materia hanno una solida base sperimentale, il problema consiste nel risalire ad una equazione d'onda a partire dal comportamento dei pacchetti d'onda nel limite di piccole lunghezze d'onda, dettato dalla meccanica classica. A priori esiste una certa arbitrarietà in questa ricostruzione, ad esempio si potrebbe immaginare di aggiungere al potenziale $V(x)$ dei termini *irrilevanti nel limite classico*. Tuttavia per costruire termini che coinvolgano la costante fondamentale $\hbar$ è necessario disporre di una grandezza di dimensione *lunghezza*$^{-2}$. In ogni problema specifico si potrà disporre di una simile grandezza, ma non in generale. La questione cambia aspetto se ammettiamo che le onde si propaghino in uno spazio dotato di *curvatura intrinseca*: in tal caso infatti è la geometria dello spazio a fornire la grandezza desiderata, lo scalare Riemanniano R, ed è pertanto ipotizzabile una correzione al potenziale proporzionale a $\hbar^2 R/m$ che ha le dimensioni fisiche corrette (vedi ad es. [**DeW57, DMO94**]).

L'equazione di Schroedinger sarà assunta ora come ipotesi di lavoro e si lavorerà in termini analitici per dedurne le conseguenze più importanti. Si noti il peculiare carattere *complesso* della **funzione d'onda** ψ che rende l'equazione radicalmente differente dalla equazione d'onda dell'ottica, in cui i campi si possono sempre assumere reali. La differenza tra

[8] I principi fondamentali della meccanica ondulatoria sono enunciati da Schroedinger in una serie di quattro lavori apparsi tutti nei primi mesi del 1926 su *Annalen der Physik* [**Sch26**]. Si veda [**Sch77**] per la traduzione in inglese.

i due casi (onde materiali e ottica) risiede nella *relazione di dispersione* rispettivamente
a) $\omega(k) = kc$ (ottica)
b) $\omega(k) = \hbar k^2/2m$ (onde materiali).
Il termine k^2 dell'equazione stazionaria si può pertanto identificare nei due casi con
a) $k^2 \propto \omega^2$
b) $k^2 \propto \omega$.
Ciò conduce a un'equazione del secondo ordine nel tempo per l'ottica e del primo ordine per le onde materiali, il che implica notevoli differenze sulle proprietà delle soluzioni. Ad esempio, mentre in ottica ondulatoria è necessaria la conoscenza ad un certo istante t_0 sia dell'ampiezza dell'onda che della sua derivata temporale, per l'equazione di Schroedinger il dato iniziale sufficiente per costruire la soluzione ad ogni istante successivo si riduce alla conoscenza della sola $\psi(\mathbf{x}, t_0)$. In ciò l'equazione di Schroedinger mostra una stretta analogia con l'equazione di diffusione

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \tfrac{1}{2} D \triangle \rho \tag{5.21}$$

ma se ne differenzia qualitativamente proprio per il carattere complesso delle soluzioni che ha origine nella unità immaginaria presente nel termine di derivata temporale. Non si tratta di una differenza puramente formale, ma investe le proprietà fisiche delle soluzioni delle due equazioni. L'equazione di diffusione rappresenta un processo **irreversibile**, come ad esempio la diffusione di calore in un mezzo conduttore. Ciò comporta una netta distinzione tra passato e futuro, ossia la "freccia di direzione temporale" è fissata. Al contrario sappiamo che la meccanica classica è descritta da equazioni reversibili nel tempo: per ogni moto di un sistema esiste una condizione iniziale che corrisponde al moto percorso in senso inverso temporale (si pensi ad esempio al moto dei pianeti in cui si immagini di invertire esattamente tutte le velocità[9]). Ciò induce a pensare che anche l'equazione di Schroedinger sia dotata della proprietà di reversibilità o, come si dice in gergo, di *invarianza per riflessione temporale*. In effetti si può facilmente constatare che la funzione

$$T\psi(\mathbf{x}, t) = \overline{\psi(\mathbf{x}, -t)}$$

soddisfa alla stessa equazione cui soddisfa $\psi(\mathbf{x}, t)$. Una discussione più precisa di questa importante proprietà dell'equazione di Schroedinger sarà fornita nel cap. 9.

[9] La presenza di campi magnetici potrà richiedere qualcosa di più che questa semplice operazione.

Conviene fissare alcune denominazioni di uso comune che impiegheremo frequentemente nel seguito. L'equazione di Schroedinger si scrive formalmente

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi \tag{5.22}$$

dove $H \equiv -\hbar^2 \triangle /2m + V(\mathbf{x})$. H è un **operatore lineare** detto *operatore Hamiltoniano* o semplicemente l'**Hamiltoniano**. La funzione ψ che compare nell'equazione di Schroedinger viene denominata **funzione d'onda** o, in un contesto un po' più generale, **vettore di stato**. Si noti che applicando H ad un'onda piana $u_k = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})$ si trova

$$Hu_k = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(\mathbf{x})\right) u_k \tag{5.23}$$

ma per la relazione di De Broglie il vettore $\hbar\mathbf{k}$ coincide con il momento lineare $\mathbf{p}$ e perciò

$$Hu_k = \left(\frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{x})\right) u_k \tag{5.24}$$

dove si riconosce la forma della Hamiltoniana classica. Questo fatto suggerisce un metodo rapido per ottenere l'Hamiltoniano a partire dalla corrispondente funzione classica $H(p_i, q^i)$: sarà sufficiente definire H come l'operatore lineare che si ottiene sostituendo ad ogni componente p_i l'operatore differenziale

$$\boxed{\mathfrak{p}_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q^i}}$$

e cioè

$$H(p_i, q^i) \to H(\mathfrak{p}_i, q^i) = H\left(-i\frac{\partial}{\partial q^i}, q^i\right) \tag{5.25}$$

L'operatore $\mathfrak{q}^i$, definito come

$$\mathfrak{q}^i\psi(\mathbf{x}) = x^i\psi(\mathbf{x}) \tag{5.26}$$

è apparentemente banale, ma conviene introdurlo per omogeneità (come vedremo più avanti ad *ogni grandezza fisica osservabile sarà associato un operatore lineare*). Questa "regola di corrispondenza" è valida se si impiegano coordinate cartesiane $\{q_1, \ldots, q_n\}$, ma è inapplicabile a coordinate curvilinee. Si trova ad esempio che per coordinate polari si deve porre

$$\mathfrak{p}_r \to -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\,. \tag{5.27}$$

Anche in coordinate cartesiane tuttavia la regola di sostituzione è in generale ambigua: che cosa si deve intendere corrispondere alla funzione

classica $\mathfrak{q}\mathfrak{p}$, che potrebbe comparire come termine additivo alla Hamiltoniana di un sistema con accoppiamenti magnetici? A livello di meccanica classica $\mathfrak{q}\mathfrak{p}$ e $\mathfrak{p}\mathfrak{q}$ sono ovviamente indistinguibili, non così gli operatori $\mathfrak{q}\mathfrak{p}$ e $\mathfrak{p}\mathfrak{q}$, che anzi soddisfano la *regola di commutazione di Heisenberg*[10]

$$\boxed{\mathfrak{q}\,\mathfrak{p} - \mathfrak{p}\,\mathfrak{q} = i\hbar\mathbb{1}} \tag{5.28}$$

che costituisce la base della formulazione algebrica della meccanica quantistica di Heisenberg, Born, Jordan e Dirac [11]. Una prescrizione ampiamente adottata è quella di simmetrizzare l'espressione della funzione classica *prima* di applicare la regola di corrispondenza, ma esistono altre prescrizioni altrettanto legittime (si veda l'App. B.8). In realtà questo non costituisce un serio problema. È del tutto naturale che vi sia una fondamentale ambiguità nel risalire all'Hamiltoniano quantistico a partire da un suo corrispondente classico, così come non ci si può aspettare che l'ottica geometrica contenga codificata in sé tutta la fisica della propagazione delle onde. C'è da aspettarsi che la meccanica quantistica sia intrinsecamente più ricca di quella classica, che però ci serve come valido punto di partenza.

Gli operatori $\mathfrak{p}, \mathfrak{q}$ assumono un'importanza fondamentale in meccanica quantistica, e vengono denominati **operatori canonici**. Una proprietà importante di essi è espressa dal

Teorema di Wintner []Gli operatori canonici non possono essere entrambi operatori limitati.

Ciò implica che lo spettro di almeno uno degli operatori deve costituire un insieme illimitato di punti. Per la dimostrazione, sorprendentemente semplice se si utilizzano gli strumenti elementari dell'analisi funzionale, si vedano ad es. [**Put67, Ono09**]. L'unica proprietà che entra nella dimostrazione è data dal fatto che $\mathfrak{p}, \mathfrak{q}$ sono operatori autoaggiunti che soddisfano le regole di commutazione di Heisenberg. L'altra proprietà cui soddisfano gli operatori canonici è costituita dal seguente[12]

Teorema di Von Neumann []Se due coppie di operatori autoaggiunti $(\mathfrak{p}, \mathfrak{q})$ e $(\mathfrak{p}', \mathfrak{q}')$ in $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^n)$ soddisfano le regole di commutazione di Heisenberg, esiste una trasformazione unitaria

$$\mathfrak{q}' = U\,\mathfrak{q}\,U^\dagger,\ \mathfrak{p}' = U\,\mathfrak{p}\,U^\dagger. \tag{5.29}$$

[10] Il simbolo $\mathbb{1}$ sta ad indicare l'*operatore unità*, tale cioè che $\mathbb{1}\psi \equiv \psi$ per ogni ψ.

[11] Le regole di commutazione canoniche in questa forma simbolica sono dovute a Dirac [**Dir25**] ed a Heisenberg, Born e Jordan [**BHJ25**] (vedi [**MR82**], vol. 3, cap. I e vol. 4, cap. IV.)

[12] In realtà ci sono alcune condizioni tecniche da introdurre dell'enunciato del teorema. Si veda più avanti a pag. 241 e la dimostrazione completa, non priva di sottigliezze, in [**Put67**].

Osservazione *[]Al fine di alleggerire la notazione, ove non ci sia pericolo di ambiguità, impiegheremo d'ora innanzi lettere latine* $\mathbf{q}$ *e* $\mathbf{p}$ *per indicare gli operatori canonici.*

Un'applicazione immediata si ha al problema della invarianza di gauge in meccanica quantistica. Dalla meccanica classica sappiamo che l'interazione di una carica con il campo elettromagnetico si descrive nel formalismo canonico attraverso la cosiddetta **sostituzione minimale**

$$\mathbf{p} \longrightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}. \tag{5.30}$$

Anche nell'equazione di Schroedinger è naturale effettuare la medesima sostituzione sugli operatori canonici. L'Hamiltoniano per un sistema di particelle di massa m_α e carica e_α sarà dato da

$$\sum_\alpha \frac{1}{2m_\alpha}\left(\mathbf{p}_\alpha - \frac{e_\alpha}{c}\mathbf{A}(\mathbf{q}_\alpha)\right)^2 + V(\mathbf{q}_\alpha)\,. \tag{5.31}$$

D'altronde è ben noto che il potenziale $\mathbf{A}$ contiene gradi di libertà sovrabbondanti, in quanto lo stato fisico del campo elettromagnetico è determinato soltanto dai campi $\mathbf{E}, \mathbf{B}$: è possibile infatti effettuare una trasformazione sul potenziale

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) \to \mathbf{A}'(\mathbf{x}) = \mathbf{A}(\mathbf{x}) + \nabla\chi(\mathbf{x}) \tag{5.32}$$

senza che cambi la fisica del problema. Dimostreremo allora il seguente

Teorema 5.2.1 []Gli operatori Hamiltoniani $H[\mathbf{A}]$ e $H[\mathbf{A}']$ sono unitariamente equivalenti, ossia esiste una trasformazione unitaria U tale che

$$H[\mathbf{A}'] = U\,H[\mathbf{A}]\,U^\dagger.$$

(Come sarà chiaro dalla formulazione generale della meccanica quantistica, due Hamiltoniani legati da una trasformazione unitaria descrivono la stessa fisica, ed è questo il risultato enunciato dal teorema.)

Dimostrazione. Si considerino gli operatori $\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c$, $\mathbf{p} - e\mathbf{A}'/c$ che compaiono nei due operatori Hamiltoniani. È chiaro che si potrà scrivere

$$\mathbf{p} - e\mathbf{A}'/c = \mathbf{p} - e\nabla\chi/c - e\mathbf{A}/c = \mathbf{p}' - e\mathbf{A}/c \Rightarrow \mathbf{p}' = \mathbf{p} - e\nabla\chi/c\,.$$

Gli operatori $\mathbf{p}'$ e $\mathbf{q}'(\equiv \mathbf{q})$ formano un insieme di operatori canonici: per questo è essenziale che il termine aggiuntivo $\nabla\chi$ sia un gradiente, come è richiesto dalla regola di commutazione canonica $[p'_i, p'_j] = 0$; si applica perciò il teorema di Von Neumann. Esplicitamente poi è immediato costruire la trasformazione unitaria U:

$$\mathbf{p}' = \exp\left(i\frac{e}{\hbar c}\chi\right)\,\mathbf{p}\,\exp\left(-i\frac{e}{\hbar c}\chi\right), \tag{5.33}$$

come si verifica applicando la formula (B.12) a p. 489 (nel caso di più particelle la trasformazione di gauge comporta una somma $\sum_\alpha e_\alpha\chi(\mathbf{q}_\alpha)$). ■

L'interazione delle particelle cariche con il campo elettromagnetico costituisce l'esempio più semplice di **interazione di gauge**; se ne troverà una trattazione più approfondita nel cap. 13.

PROBLEMA 5.2-4 [] Applicare la sostituzione $\mathbf{p} \to -i\hbar\nabla$ all'Hamiltoniana classica relativistica $H = c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2c^2}$ e ricavarne l'equazione di Schroedinger corrispondente.

SOLUZIONE *[]L'equazione che si ottiene meccanicamente attraverso la sostituzione comporta una radice quadrata di un operatore differenziale; a questo si dà facilmente un significato in termini di trasformata di Fourier:*

$$i\hbar\,\partial_t\psi = c\sqrt{-\hbar^2\nabla^2 + m^2c^2}\,\psi$$

$$\psi = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int d^3p\,\phi(\mathbf{p},t)\,\exp(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar)$$

da cui segue

$$i\hbar\,\partial_t\phi(\mathbf{p},t) = c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2c^2}\,\phi$$

Tuttavia quest'equazione, per quanto ben definita dal punto di vista matematico, presenta proprietà fisiche insoddisfacenti (vedi [**Sch64**]*). Si preferisce considerare l'equazione che si ottiene derivando una seconda volta rispetto al tempo*

$$-\hbar^2\partial_t^2\psi = -c^2\hbar^2\nabla^2\psi + m^2c^4\psi$$

che si può mettere nella forma manifestamente invariante di Lorentz

$$\Box\psi \equiv \left(\frac{1}{c^2}\partial_t^2 - \triangle\right)\psi + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\psi = 0\,. \tag{5.34}$$

Si trova così un'equazione che si riduce all'equazione d'onda per $m \to 0$ e che prende il nome di equazione di **Klein-Gordon**. *L'equazione contiene una costante con le dimensioni di una lunghezza, $\hbar/mc$, che è proprio la* **lunghezza d'onda Compton** *della particella. Nel caso dell'elettrone questa vale approssimativamente*

$$\frac{\hbar}{mc} = \frac{\hbar c}{mc^2} \sim 400\ \text{fm} = 4\times10^{-13}\,\text{m}\,,$$

dunque circa quattrocento volte le dimensioni caratteristiche di un nucleo, che corrispondono invece esattamente alla lunghezza d'onda Compton dei mesoni π, la cui esistenza fu ipotizzata da **Yukawa** *proprio sulla base di questa equazione d'onda*[13].

Le regole di commutazione canoniche (5.28) assumono un significato fisico alla luce del teorema generale che illustreremo più avanti (vedi il §7.3.3). Da esse discende infatti che, come anticipato nel §5.1.5, esiste un limite assoluto alla precisione con cui è possibile misurare contemporaneamente posizione e momento lineare di una particella (**principio di indeterminazione** di Heisenberg, si veda il successivo §**??**).

[13] 200 MeV fm è un'ottima approssimazione per $\hbar c$. Si veda la tabella a pag. 519 per i valori più precisi di $\hbar c$ e mc^2.

PROBLEMA 5.2-5 [] Verificare che le due matrici infinite Q e P definite da

$$Q = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots & \dots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \sqrt{n-1} & 0 & \sqrt{n} & \dots \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$P = i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \dots & \dots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \sqrt{n-1} & 0 & -\sqrt{n} & \dots \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

soddisfano le regole di commutazione di Heisenberg; secondo il teorema di Von Neumann deve perciò esistere una trasformazione unitaria che lega (Q, P) agli operatori canonici (q, p). Dimostrare inoltre che la matrice $(P^2 + \omega^2 Q^2)$ è una matrice diagonale con autovalori $(2n+1)\hbar\omega$.

Osservazione *[]Il problema precedente illustra una via alternativa allo sviluppo della nuova meccanica. Abbiamo finora seguito il metodo di Schroedinger, la meccanica ondulatoria; un'altro metodo, più astratto, è quello della* **meccanica delle matrici**, *sviluppato da Heisenberg, Born e Jordan in* [**BHJ25**] *(vedi* [**Hei63, Kem37, MR82**]*). In essa si parte dall'assunto che le osservabili fisiche sono descritte da matrici e, in particolare, le variabili di posizione e impulso devono essere rappresentate da matrici "canoniche", quali* (Q, P). *Si deve allo stesso Schroedinger (vedi* [**Sch77**]*) la dimostrazione del fatto fondamentale che le due formulazioni sono equivalenti: le* matrici *di Heisenberg–Born–Jordan sono precisamente le "matrici–rappresentative" degli operatori differenziali* (q, p) *nella base delle autofunzioni dell'Hamiltoniano, secondo un linguaggio che introdurremo gradualmente nel seguito (vedi §5.2.5, §5.2.7 e per la trattazione generale il cap. 7). La formulazione generale della meccanica quantistica è opera essenzialmente di P. A. M. Dirac.*

5.2.4. Onde di probabilità. L'idea fisica alla base della meccanica ondulatoria di Schroedinger è dunque molto semplice. L'origine della quantizzazione dei livelli atomici è da ricercare nel carattere ondulatorio delle particelle materiali che fa sì che gli stati stazionari di un atomo siano assimilabili ad onde stazionarie di vibrazione elastica di un mezzo continuo. Resta a questo punto però da chiarire se questa è solo un'utile analogia o se al contrario esista concretamente un mezzo elastico a livello microscopico. Quest'ultimo punto di vista è chiaramente inaccettabile per

vari motivi: l'idea che una particella carica come l'elettrone possa essere estesa su distanze della scala dell'Ångström o addirittura del micron è in netto contrasto con il fatto che l'elettrone si manifesta sempre come particella puntiforme, senza struttura interna. Nei fenomeni di interferenza che si osservano con elettroni lenti, il fatto cruciale consiste nella circostanza secondo cui *le frange di diffrazione sono formate dall'accumularsi di un grande numero di elettroni sulla lastra fotografica* e ci si trova perciò di fronte al problema di rendere conto dei fatti seguenti:
a) *ogni elettrone dà origine a un singolo punto sullo schermo*
b) *l'accumularsi di un grande numero di elettroni ricostruisce la figura di diffrazione*, e infine
c) *l'interferenza non può essere dovuta a interazione tra gli elettroni*, in quanto è possibile dosare il fascio elettronico a un flusso tanto debole da potere considerare che ogni elettrone arrivi del tutto isolatamente sullo schermo[14]. Se la carica dell'elettrone fosse davvero distribuita in un atomo su distanze dell'ordine del raggio di Bohr resterebbe da spiegare il motivo per cui le varie componenti cariche di questo fluido non interagiscono tra di loro; si dovrebbe cioè tenere conto di una forza repulsiva di autointerazione. Al contrario il successo dell'equazione di Schroedinger nel calcolare i livelli atomici con notevole precisione esclude un'autointerazione di questo genere.

Ci troviamo ora di fronte a quello che può essere considerato il problema centrale nella comprensione della meccanica ondulatoria: nell'esperienza delle due fenditure *dobbiamo allo stesso tempo attribuire all'elettrone la natura di particella puntiforme e quella di onda estesa nello spazio*. La nuova meccanica deve conciliare questi due concetti in modo consistente. Dobbiamo osservare a questo punto che i modelli concettuali (quello di onda e quello di particella) sono ovviamente legati alla nostra esperienza del mondo macroscopico; non dovremmo sorprenderci che addentrandoci nel mondo atomico (e cioè scendendo di dieci ordini di grandezza nella scala delle lunghezze e ancor di più nella scala delle masse) questi modelli possano risultare inadeguati. L'evidenza fisica ci costringe allora a introdurre un nuovo concetto di particella quantistica (il *quantone*, come viene definito nell'opera di Lévy-Leblond e Balibar [**LLB90**]) dotato di proprietà *non riconducibili a una modellistica macroscopica*.
Accettata l'idea che la descrizione della fisica alla scala atomica richieda un nuovo modello, resta da individuare quale significato attribuire alla funzione d'onda. Già pochi mesi dopo la pubblicazione del primo lavoro

[14] La figura 5-2 è ottenuta attraverso una simulazione numerica; si veda [**MMP76**] per la descrizione dell'esperimento reale. Si veda anche [**K$^+$84**] per una ricca presentazione di fotografie di interferometria elettronica. Per una trattazione teorica dell'esperimento si veda il §7.9.1

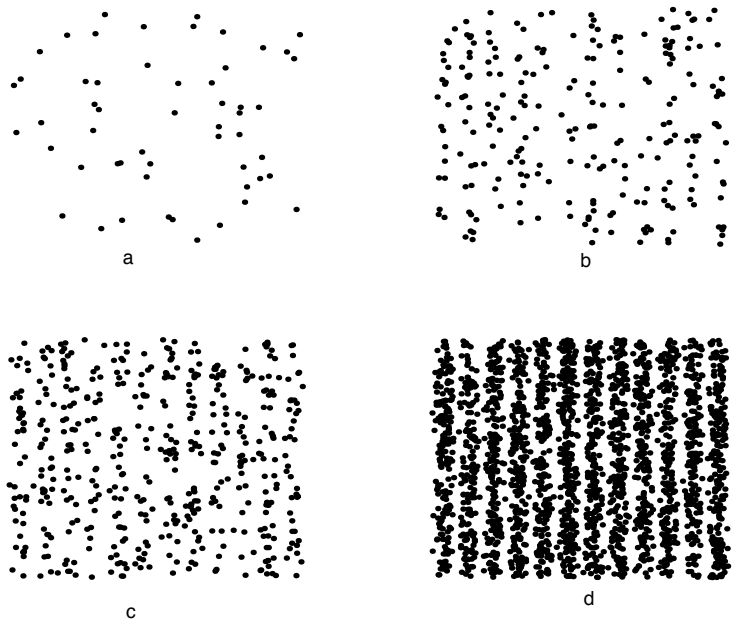


FIGURA 5-2. *La formazione di frange di interferenza originate o dall'accumularsi di elettroni su una lastra fotografica simulata numericamente; a*) 100 particelle, b) 500 , c) 1000, d) 5000.

di Schroedinger tuttavia Max Born [**Bor60**] avanzò l'ipotesi secondo cui la natura ondulatoria delle particelle atomiche fosse da interpretare in un modo del tutto rivoluzionario: la funzione d'onda di Schroedinger *è da intendere in senso probabilistico*, essa cioè contiene informazioni statistiche sullo stato del sistema microscopico. Più precisamente, la funzione $\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ costituisce la **densità di probabilità** relativa alla posizione della particella; in altre parole, la probabilità che la particella sia rivelata in un volume V è data dall'integrale della ρ esteso a V. La funzione ψ è detta perciò l'**ampiezza di probabilità**. In questa interpretazione del significato fisico della funzione d'onda sta tutto il carattere rivoluzionario della nuova meccanica. Ad un esame più approfondito ci si rende conto infatti che la natura *lineare* dell'equazione di Schroedinger per l'ampiezza di probabilità rende la teoria radicalmente differente da una teoria di dinamica classica in presenza di una componente "stocastica" o "aleatoria", quali ad esempio le teorie che descrivono il moto browniano. Vi sono stati numerosi tentativi, anche recenti (vedi ad es.[**Nel67**]) per ricuperare un'interpretazione della meccanica ondulatoria in termini più

tradizionali — la necessità di una descrizione statistica delle particelle elementari sarebbe dovuta ad un campo subatomico non osservabile che perturba il movimento delle particelle in modo del tutto casuale — ma questo tipo di interpretazioni, oltre a non offrire una descrizione più semplice, nel migliore dei casi riproducono gli stessi risultati della meccanica ondulatoria al prezzo di introdurre elementi non osservabili e con caratteristiche del tutto peculiari (in un certo senso simili a quelle dell'*etere*, introdotto quale supporto delle onde elettromagnetiche e poi dimostrato del tutto eliminabile dalla teoria). L'interpretazione probabilistica della funzione d'onda supera di un colpo solo le difficoltà legate alla carica estesa e rende conto della natura delle frange di interferenza elettronica cui abbiamo accennato in precedenza. Nel seguito entreremo gradualmente in contatto con le conseguenze di questa impostazione della meccanica ondulatoria, non prive di aspetti talora apparentemente in contrasto con l'intuizione. Lo sforzo che si richiede ad un primo avvicinarsi alla nuova teoria è duplice, sia concettuale che tecnico, legato all'acquisizione degli strumenti matematici necessari per sviluppare la teoria.

5.2.5. Proprietà matematiche dell'equazione. Prima di approfondire gli aspetti teorici legati all'interpretazione fisica dell'equazione di Schroedinger e della funzione d'onda (Cap. 7), esploreremo le principali proprietà dell'equazione dal punto di vista matematico. L'equazione è innanzitutto *lineare, omogenea e del primo ordine del tempo.* La linearità comporta che date due soluzioni $\psi_1(x,t)$ e $\psi_2(x,t)$ anche una loro arbitraria combinazione lineare $\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$ rappresenta una soluzione, per qualunque scelta dei parametri complessi α_i. Lo spazio di tutte le soluzioni è perciò uno spazio lineare ed ogni soluzione è identificabile con un vettore in tale spazio; si può facilmente constatare che la dimensione di questo spazio è infinita, il che costituisce una inevitabile sorgente di difficoltà che saranno da affrontare armati della matematica adeguata (analisi funzionale). Per ogni coppia di vettori nello spazio verrà definito un **prodotto scalare**

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle \equiv \int d^3x\, \overline{\psi_1}\, \psi_2 \tag{5.35}$$

che conferisce allo spazio delle soluzioni dell'equazione di Schroedinger una struttura di **spazio metrico**. Gli spazi funzionali che si considerano nelle applicazioni di meccanica quantistica sono caratterizzati dalla ulteriore proprietà di costituire *spazi di Hilbert separabili*: si tratta di spazi in cui vale il criterio di convergenza di Cauchy e che ammettono una base numerabile. Per gli elementi di analisi lineare che costituiscono requisito fondamentale per tutta la meccanica quantistica, rimandiamo a

[**BRS93, Ono09**]. Ricordiamo almeno a questo punto, però, la *notazione di Dirac* per indicare i vettori in uno spazio di Hilbert. Un qualunque vettore sarà rappresentato dal simbolo $|\ \rangle$, detto **ket**. Vettori differenti saranno distinti inserendo nel simbolo tutto quanto necessario allo scopo, ad es. $|E_n\rangle$ può rappresentare una soluzione con energia E_n, oppure $|\mathbf{k}\rangle$ un'onda piana di numero d'onde $\mathbf{k}$. La comodità della convenzione si apprezzerà nel seguito (si veda ad es. il cap. 8). Ad ogni vettore è associato (per il noto teorema di Riesz) un funzionale lineare: questo è indicato con il simbolo $\langle\ |$, detto **bra**. Il valore del funzionale lineare $\langle 1|$ sul vettore $|2\rangle$ si indica mettendo uno di fianco all'altro i due simboli $\langle 1||2\rangle$ o più convenientemente $\langle 1|2\rangle$, che suggerisce perciò l'interpretazione di $\langle\ |$ come il coniugato di $|\ \rangle$ e in modo naturale $\langle 1|2\rangle$ rappresenta il prodotto scalare tra i due vettori. Altre combinazioni di *bra* e *ket* sono ammissibili; ad es. l'accostamento $|1\rangle\langle 2|$ ha un significato immediatamente visibile; applicando questo oggetto a qualunque vettore $|3\rangle$ si ottiene $|1\rangle\langle 2|3\rangle$ che rappresenta un vettore parallelo a $|1\rangle$ per qualunque $|3\rangle$; si tratta perciò di un operatore lineare di proiezione.

Per una base di vettori ortonormale $\{|n\rangle\,|n = 1, 2, \ldots\}$ le **relazioni di completezza** e di **ortogonalità** assumono una forma molto semplice nel formalismo di Dirac

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}\,, \quad \langle n|k\rangle = \delta_{nk}\,.$$

Si trova ad esempio, sfruttando la relazione di completezza, come il prodotto scalare di due vettori si esprime in termini delle componenti

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_n \langle\phi|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n \overline{\phi_n}\psi_n\,.$$

Ricordiamo infine che valgono le identità $\overline{\langle 1|2\rangle} = \langle 2|1\rangle$ e

$$\overline{\langle 1|A|2\rangle} = \langle 2|A^\dagger|1\rangle$$

essendo $A^\dagger$ il **coniugato Hermitiano** dell'operatore lineare A. D'ora in poi indicheremo con $\psi(\mathbf{x})$ la funzione d'onda e con $|\psi\rangle$ il vettore che le corrisponde nella visione più astratta in termini di spazi lineari, e secondo necessità passeremo dall'una all'altra notazione senza preavviso. L'equazione di Schroedinger stazionaria si scrive allora simbolicamente

$$H\,|E\rangle = E\,|E\rangle\ ; \tag{5.36}$$

il vettore $|E\rangle$ si dice un **autovettore** dell'energia *appartenente* all'**autovalore** E (la corrispondente funzione d'onda $\psi(x)$ si dice invece un'*autofunzione* dell'energia). Un determinato autovalore dell'energia si dice *non-degenere* se la corrispondente autofunzione è determinata univocamente, a meno s'intende di una costante di proporzionalità. L'autovalore dell'energia si dirà invece n-*volte degenere* allorché ad esso appartengono n

autovettori linearmente indipendenti. Impareremo a collegare questa proprietà alle proprietà di simmetria del sistema fisico.

Utilizzando la relazione di completezza si esprime facilmente l'azione di un qualunque operatore lineare A in una data base nel modo seguente:

$$\begin{aligned} A\,|n\rangle &= \sum_m |m\rangle\,\langle m|\,A\,|n\rangle \\ &\equiv \sum_m A_{mn}\,|m\rangle\ , \end{aligned}$$

dove $A_{mn} = \langle m|A|n\rangle$ costituisce una matrice infinito–dimensionale che viene denominata la *matrice rappresentativa* dell'operatore A. Si verifica facilmente in base alla definizione che ad un prodotto di operatori AB viene associata la matrice rappresentativa ottenuta mediante il prodotto *righe per colonne* delle due matrici rappresentative dei due operatori. Si noti che la matrice rappresentativa dell'Hamiltoniano nella base dei suoi autovettori è una matrice diagonale

$$\left\langle E'\right|\,H\,\left|E''\right\rangle = E'\delta_{E'E''}\ ,$$

e in base a questa proprietà la determinazione delle autofunzioni dell'equazione di Schroedinger è equivalente alla *diagonalizzazione dell'Hamiltoniano*. Secondo il risultato del Probl. 5.2-5 possiamo concludere che gli autovalori dell'Hamiltoniano che descrive un oscillatore armonico $\frac{1}{2}(P^2 + \omega^2 Q^2)$ sono dati da $E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$, un risultato che ritroveremo nel §6.2 in modo più sistematico.

Torniamo ora all'equazione di Schroedinger; dal momento che, come già accennato in precedenza, una soluzione è individuata univocamente dall'assegnazione della funzione d'onda ad un determinato istante di tempo, lo spazio delle soluzioni sarà identificabile con lo spazio delle possibili *condizioni iniziali* $\{\psi(\mathbf{x}, t_0)\}$. Quali condizioni dobbiamo imporre alla funzione d'onda affinché sia fisicamente accettabile? Non avendone ancora discusso l'interpretazione fisica, sembrerebbe prematuro porre condizioni sulle ψ, e tuttavia è necessario almeno circoscrivere l'insieme di possibili stati iniziali: assumeremo che ogni stato iniziale sia caratterizzato da una funzione differenziabile (C^∞) e tale che esista l'integrale

$$\langle\psi|\psi\rangle \equiv \int d^3x\,\overline{\psi(\mathbf{x})}\,\psi(\mathbf{x})$$

Una tale funzione d'onda si dice *liscia e a quadrato sommabile*. Più in generale si deve ammettere di estendere l'equazione di Schroedinger a uno spazio costituito da tutte *le (classi di equivalenza di) successioni di Cauchy* $(\psi_1, \psi_2, ...\psi_n, ...)$. Si ottiene in tal modo uno spazio di Hilbert individuato con il simbolo $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)$. Tuttavia nel considerare l'applicazione di un operatore lineare come H dovremo in genere limitarci ad un sottospazio opportuno dello spazio di Hilbert, il *dominio* dell'operatore.

Nel caso dell'operatore che definisce l'equazione di Schroedinger dovremo assumere che le funzioni d'onda siano differenziabili con derivate parziali *assolutamente continue* ed infine si richiederà che la funzione $H\psi$ sia a sua volta a quadrato sommabile. Non avremo necessità di entrare in questi dettagli matematici troppo di frequente; tuttavia è il caso di sottolineare che talune proprietà elementari dell'equazione di Schroedinger dipendono in modo cruciale dall'appartenenza della funzione d'onda al corretto dominio dell'operatore Hamiltoniano.

Teorema 5.2.2 [] Il prodotto scalare di due soluzioni dell'equazione di Schroedinger non dipende dal tempo.

Dimostrazione. La dimostrazione è del tutto diretta:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\psi_1|\psi_2\rangle &= \langle\frac{d}{dt}\psi_1|\psi_2\rangle + \langle\psi_1|\frac{d}{dt}\psi_2\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar}\left(-\langle H\psi_1|\psi_2\rangle + \langle\psi_1|H\psi_2\rangle\right) .\end{aligned}$$

(Si noti il cambiamento di segno dovuto al fatto che il prodotto scalare $\langle\psi|\phi\rangle$ è lineare in ϕ e *antilineare* in ψ). Si tratta di mostrare perciò che per l'Hamiltoniano vale la proprietà

$$\langle H\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|H\psi_2\rangle \tag{5.37}$$

ossia l'Hamiltoniano deve essere *Hermitiano*[15]. Per dimostrare questa identità introduciamo in via preliminare un volume finito Ω avente superficie di bordo $B = \partial\Omega$. Il risultato sarà ottenuto nel limite in cui Ω riempie tutto lo spazio (possiamo pensare a Ω in termini di una sfera di raggio R e il limite considerato sarà $R \to \infty$). La proprietà discende da una semplice applicazione del teorema di Gauss nella forma

$$\int_\Omega (u \triangle v - v \triangle u)\, d^3x = \oint_{\partial\Omega} (u\partial_n v - v\partial_n u)\, d^2\sigma \tag{5.38}$$

avendo indicato con ∂_n la derivata normale e con $d^2\sigma$ l'elemento d'area sulla superficie di contorno. Si ha perciò, tenendo conto della cancellazione dei due termini contenenti il potenziale,

$$\begin{aligned}\langle H\psi_1|\psi_2\rangle - \langle\psi_1|H\psi_2\rangle &= \frac{\hbar^2}{2m}\iiint_\Omega \left(\overline{\psi}_1 \triangle \psi_2 - \psi_2 \triangle \overline{\psi}_1\right) d^3x \\ &= \iint_{\partial\Omega} (\overline{\psi}_1\partial_n\psi_2 - \psi_2\partial_n\overline{\psi}_1)\, d^2\sigma\end{aligned}$$

e nel limite in cui Ω riempie tutto lo spazio l'integrale di superficie deve tendere a zero. Ciò non è in generale vero per ogni coppia di funzioni a quadrato sommabile ma si dimostra valere per le funzioni che appartengono al dominio dell'Hamiltoniano. ■

[15] Sorvoliamo a questo livello sulle differenze, seppure sostanziali, esistenti tra operatori *simmetrici* e *autoaggiunti*.

5.2.6. Corrente di probabilità. Dal teorema 5.2.2 appena dimostrato segue come caso particolare ($\psi_1 = \psi_2 \equiv \psi$), che la **norma** della funzione d'onda definita da

$$\|\psi\| \equiv \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{5.39}$$

è indipendente dal tempo e alla luce della interpretazione probabilistica della funzione d'onda potremo sempre porre $\|\psi\| = 1$ (diremo allora che la funzione d'onda *è normalizzata*). La quantità $\rho \equiv |\psi|^2$ è pertanto una densità **conservata** nel tempo: in effetti se valutiamo la derivata temporale della funzione ρ scopriamo che è possibile identificarla con la divergenza di un campo vettoriale che assume pertanto il ruolo di **corrente** (più precisamente **densità di corrente**). Si ha infatti, inserendo quanto ci è offerto dall'equazione di Schroedinger,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\rho}{\partial t} &= \overline{\psi}\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial\overline{\psi}}{\partial t}\psi \\
&= \frac{1}{i\hbar}\left(\overline{\psi}\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\triangle\psi + V(\mathbf{x})\psi\right) - \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\triangle\overline{\psi} + V(\mathbf{x})\overline{\psi}\right)\psi\right) \\
&= \frac{i\hbar}{2m}(\overline{\psi}\triangle\psi - \psi\triangle\overline{\psi}) \\
&= \frac{i\hbar}{2m}\mathrm{div}(\overline{\psi}\nabla\psi - \psi\nabla\overline{\psi}) \equiv -\mathrm{div}\,\mathbf{j}(\mathbf{x},t)
\end{aligned} \tag{5.40}$$

avendo applicato una formula elementare di analisi vettoriale secondo cui

$$\mathrm{div}(f_1\nabla f_2) = \nabla f_1\cdot\nabla f_2 + f_1\triangle f_2. \tag{5.41}$$

L'espressione che abbiamo ricavato per la corrente assume una forma intuitiva se sostituiamo alla funzione d'onda la forma

$$\psi(\mathbf{x}) = \sqrt{\rho(\mathbf{x})}\exp\{iW(\mathbf{x})/\hbar\} \tag{5.42}$$

Si ottiene infatti

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = \mathfrak{Re}\left\{\overline{\psi}\frac{\mathbf{p}}{m}\psi\right\} = \frac{\hbar}{m}\,\mathfrak{Im}\,\{\overline{\psi}\nabla\psi\} \tag{5.43}$$

e con un semplice calcolo si trova

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = \rho\nabla W/m \tag{5.44}$$

Questa è d'altronde l'espressione che dobbiamo aspettarci tenendo conto che ∇W coincide con il momento lineare (identificando W con la funzione di Hamilton introdotta nel §2.3.3) e dunque la corrente equivale al prodotto della densità per la velocità. Si noti che qualunque soluzione dell'equazione di Schroedinger che sia reale, o più in generale con una fase indipendente da $\mathbf{x}$, avrà densità di corrente nulla. Il campo vettoriale $\mathbf{j}(\mathbf{x})$ rappresenta la (densità di) corrente relativa alla densità di probabilità ρ: $\mathbf{j}$ rappresenta quindi la **corrente di probabilità**. .

Un'equazione lineare per la densità. La densità ρ nel caso stazionario soddisfa ad un'equazione lineare che può essere utilmente applicata al calcolo di certi integrali. Derivando successivamente rispetto a x si ottiene infatti (assumendo ψ reale, ma anche questa condizione si può eliminare)

$$\begin{aligned}
\frac{d\rho}{dx} &= 2\psi\psi' \\
\frac{d^2\rho}{dx^2} &= \frac{4m}{\hbar^2}(V(x)-E)\,\rho + 2\psi'^2 \\
\frac{d^3\rho}{dx^3} &= \frac{8m}{\hbar^2}(V(x)-E)\,\rho' + \frac{4m}{\hbar^2}V'(x)\,\rho
\end{aligned}$$

e quindi

$$\frac{\hbar^2}{8m}\rho''' = (V(x)-E)\,\rho' + \tfrac{1}{2}V'(x)\,\rho\,. \tag{5.45}$$

Ora, del tutto in generale, se una densità soddisfa un'equazione differenziale lineare, da questa si può ricavare *una relazione di ricorrenza sui momenti* $\langle x^k\rangle \equiv \int x^k\,\rho\,dx$. È sufficiente integrare per parti più volte per ottenere

$$\tfrac{1}{2}\left\langle V'(x)\,x^k\right\rangle + k\left\langle (V(x)-E)\,x^{k-1}\right\rangle = \frac{\hbar^2}{8m}\,k(k-1)(k-2)\left\langle x^{k-3}\right\rangle\,, \tag{5.46}$$

avendo assunto l'annullamento di ogni contributo al contorno, come è il caso per un problema definito su $\mathbb{R}$. Questa relazione generalizza il *teorema del viriale* che corrisponde a $k=1$:

$$\tfrac{1}{2}\left\langle x\,V'(x)\right\rangle = \langle E - V(x)\rangle\,. \tag{5.47}$$

Vedremo un'applicazione di questa formula nel Probl. 6.6-35 a p. 164.

PROBLEMA 5.2-6 []Considerare il problema precedente nel caso di una particella vincolata alla semiretta reale positiva. Dimostrare che in questo caso ci sono contributi al contorno e che vale la relazione

$$\left\langle V'(x)\right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}|\psi'(0)|^2\,. \tag{5.48}$$

PROBLEMA 5.2-7 []Dimostrare che l'equazione (5.45) è equivalente alla seguente

$$\frac{\hbar^2}{8m}\,\rho''' + \sqrt{E-V(x)}\,\frac{d}{dx}\left(\sqrt{E-V(x)}\,\rho\right) = 0\,. \tag{5.49}$$

5.2.7. Soluzioni stazionarie. La soluzione dell'equazione di Schroedinger si può mettere simbolicamente nella forma

$$\psi(\mathbf{x},t) = \exp\left(-i\,H\,t/\hbar\right)\psi(\mathbf{x},0) \tag{5.50}$$

se ammettiamo che la funzione esponenziale sia stata definita per gli operatori lineari in modo da mantenerne le proprietà formali di cui gode in campo complesso. L'analisi funzionale [**Tay58, Nai68, BRS93, Ono09**] fornisce gli strumenti adatti per tradurre l'espressione formale $\exp(-iHt/\hbar)$ in una costruzione matematicamente ben definita. Questo strumento è quello dello **sviluppo spettrale** dell'operatore H. Per ogni operatore autoaggiunto esiste una rappresentazione del tipo

$$\begin{aligned} H &= \int \lambda d\hat{E}_\lambda \\ &= \sum_{\lambda\in\sigma_d(H)} \lambda\, \hat{P}_\lambda + \int_{\lambda\in\sigma_c(H)} \lambda\, d\hat{E}_\lambda \end{aligned} \tag{5.51}$$

dove gli operatori $\hat{E}_\lambda$ costituiscono una **famiglia spettrale** (vedi l'App. B.9) e conviene mettere in evidenza le due componenti dello **spettro**: l'insieme dei numeri reali $\sigma(H) = \sigma_d(H) \cup \sigma_c(H)$ costituisce lo spettro dell'operatore H, σ_d ne è la parte discreta e σ_c quella continua. I proiettori $\mathbf{P}_\lambda$ sono definiti dalla discontinuità della famiglia spettrale $\hat{E}_\lambda$ nei punti dello spettro discreto. Determinare lo spettro e la famiglia spettrale dell'Hamiltoniano costituisce il problema centrale nelle applicazioni della meccanica quantistica. Vedremo nel seguito quali tecniche sono state sviluppate per risolvere questo problema. Al di fuori di casi molto semplici è necessario ricorrere a metodi di approssimazione (vedi cap. 10). Nella pratica, anziché la forma astratta di $\hat{E}_\lambda$, se ne considera la rappresentazione in termini di autovettori propri e generalizzati:

$$P_\lambda = \sum_\alpha |\lambda,\alpha\rangle\langle\lambda,\alpha| \ , \quad d\hat{E}_\lambda = \sum_\alpha |\lambda,\alpha\rangle\, d\lambda\, \langle\lambda,\alpha|$$

dove l'indice α è in generale necessario per i livelli energetici degeneri. Anziché approfondire ora in generale il significato di queste formule procederemo attraverso esempi espliciti.

Spettro discreto. Consideriamo innanzitutto il problema di determinare lo spettro discreto. Si tratta di determinare tutti i valori reali E (utilizziamo d'ora in poi il simbolo E per gli autovalori dell'energia) per i quali esistono soluzioni a quadrato sommabile dell'equazione

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{5.52}$$

I valori di E si chiamano *autovalori* dell'energia e le corrispondenti soluzioni vengono denominate *autofunzioni* dell'energia. Un determinato autovalore dell'energia si dice *non-degenere* se la corrispondente autofunzione è determinata univocamente, a meno s'intende di una costante di

proporzionalità. L'autovalore dell'energia si dirà invece n-*volte degenere* allorché esistono n soluzioni linearmente indipendenti. Impareremo a collegare questa proprietà alle proprietà di simmetria del sistema fisico.

Il problema della determinazione dello spettro d'energia non è molto diverso, dal punto di vista matematico, da quello che abbiamo incontrato nello studio della dinamica lineare dei mezzi continui. In quel caso lo spettro è l'insieme delle frequenze dei modi normali. L'esistenza dei livelli energetici discreti negli atomi suggerì appunto l'idea che ci sia un fenomeno ondulatorio al fondamento della fisica atomica. La differenza che riscontriamo immediatamente tra l'equazione di Schroedinger e le equazioni classiche che descrivono mezzi elastici è data dalla mancanza di condizioni al contorno. L'equazione di Schroedinger è definita in tutto lo spazio $\mathbb{R}^3$ e ciò comporta che non tutti i potenziali $V(x)$ danno luogo ad uno spettro discreto di energia; d'altra parte la fisica atomica mostra che i sistemi atomici presentano sia livelli discreti di energia sia un continuo di valori che corrispondono agli stati di ionizzazione. Il successo della nuova meccanica basata sull'equazione di Schroedinger sta proprio della capacità di descrivere in un formalismo unificato entrambe le componenti dello spettro.

Si tenga presente che con una nomenclatura derivata dalla fisica atomica, lo stato di energia più bassa di un qualunque sistema fisico viene denominato **stato fondamentale**, mentre gli stati a energia più alta sono detti genericamente **stati eccitati**. Ciò allude al fatto che un atomo, che si trova ordinariamente nel suo stato fondamentale, può essere "eccitato" ad un livello più alto in seguito ad una interazione con altri atomi, con radiazione elettromagnetica ecc. (si veda [**FR95**]).

PROBLEMA 5.2-8 []Dimostrare che gli autovalori dell'energia sono reali e le corrispondenti autofunzioni sono ortogonali

$$\langle E_1 | E_2 \rangle = 0 \quad (\text{se } E_1 \neq E_2)$$

SOLUZIONE *[]Il carattere reale degli autovalori discende immediatamente dalla proprietà* $H = H^\dagger$ *che permette di scrivere*

$$\overline{\langle \phi | H | \psi \rangle} \equiv \langle \psi | H | \phi \rangle$$

e pertanto

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = E \langle \psi | \psi \rangle \ , \quad \overline{\langle \psi | H | \psi \rangle} = \overline{E} \langle \psi | \psi \rangle \ ,$$

il che implica che E *deve essere reale. Partendo ora dalle due equazioni*

$$H | \psi_1 \rangle = E_1 | \psi_1 \rangle \ , \quad H | \psi_2 \rangle = E_2 | \psi_2 \rangle \ ,$$

si prende il prodotto scalare di entrambi i membri rispettivamente con il secondo e il primo vettore in modo da ottenere

$$\begin{aligned} \langle \psi_2 | H | \psi_1 \rangle &= E_1 \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \\ \langle \psi_1 | H | \psi_2 \rangle &= E_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \ . \end{aligned}$$

Si prende infine la differenza membro a membro tra la prima equazione e la coniugata complessa della seconda, ottenendo:

$$0 = (E_1 - E_2)\langle\psi_2|\psi_1\rangle$$

il che, unitamente a $E_1 \neq E_2$*, implica* $\langle\psi_2|\psi_1\rangle = 0$.

Autofunzioni appartenenti allo stesso autovalore dell'energia (stati cosiddetti *degeneri*) non sono necessariamente ortogonali. Tuttavia da una qualunque base di autofunzioni degeneri possiamo sempre costruire (in infiniti modi possibili) una base ortogonale applicando il procedimento di Schmid. In ogni caso perciò esiste una base ortogonale di autofunzioni, che possiamo anche assumere di lunghezza unitaria. Si dice allora che si è introdotta una **base ortonormale** di autofunzioni.

Spettro continuo. Si avrà in generale anche una componente continua dello spettro, che non corrisponde ad autofunzioni in senso stretto. Se $\hat{E}_\lambda$ è la famiglia spettrale dell'Hamiltoniano, la componente continua dello spettro corrisponde all'insieme di punti in cui la funzione $\|\hat{E}_\lambda\psi\|$ è continua e strettamente non-costante per qualche vettore ψ. Una definizione semplificata di autofunzione dello spettro continuo, che ha il pregio di essere abbastanza intuitiva, è la seguente.

Definizione 5.2.1 *[]Si dice che* E *è un autovalore dell'energia nello spettro continuo se*
a) $H\psi = E\psi$ *non ammette soluzioni a quadrato sommabile;*
b) *esiste una successione di vettori* $\{\psi_n\}$ *di norma unitaria tali che*

$$\lim_{n\to\infty}\|(H - E)\psi_n\| = 0\,.$$

La successione ψ_n può essere identificata con $\mathcal{N}(\hat{E}_{\lambda+1/2n^2} - \hat{E}_{\lambda-1/2n^2})\Psi$ per qualche Ψ opportunamente scelto e con $\mathcal{N}$ fissato dalla condizione di normalizzazione. La definizione si applica in generale per ogni operatore lineare nello spazio di Hilbert. Ad esempio per gli **operatori canonici** troviamo che lo spettro discreto è vuoto e tutto lo spettro è costituito dalla componente continua.

PROBLEMA 5.2-9 [] Dimostrare che lo spettro dell'operatore q è costituito da tutto l'asse reale.

SOLUZIONE *[]L'equazione* $q\psi(x) = \lambda\psi(x)$ *implica* $(x-\lambda)\psi(x) = 0$ *il che significa che la funzione d'onda è nulla quasi dappertutto (e perciò è il vettore nullo). Non esistono quindi autofunzioni dello spettro discreto per* q*. D'altra parte per ogni reale* λ *si consideri la successione di funzioni*

$$\psi_n(x) = \begin{cases} 0 & \textit{per } |x-\lambda| > \frac{1}{2}n^{-2} \\ n & \textit{per } |x-\lambda| < \frac{1}{2}n^{-2} \end{cases}, \quad (n = 1, 2, \ldots).$$

Si trova immediatamente (ponendo $y = x - \lambda$*)*

$$\|\psi_n\|^2 = \int_{-\frac{1}{2}n^{-2}}^{\frac{1}{2}n^{-2}} n^2 dy = 1$$

$$\|(q-\lambda)\psi_n\|^2 = \int_{-\frac{1}{2}n^{-2}}^{\frac{1}{2}n^{-2}} n^2 y^2 \, dy = \tfrac{1}{4}n^{-4}$$

e dunque $\lambda \in \sigma_c$*. L'intuizione dice che la successione di funzioni rappresenta degli stati in cui il valore della posizione sull'asse reale è sempre più concentrato intorno a* λ*.*

PROBLEMA 5.2-10 []Dimostrare che lo spettro dell'operatore p è costituito da tutto l'asse reale.

SOLUZIONE *[]Valgono considerazioni identiche a quelle applicate per l'operatore* q*; conviene ovviamente lavorare nello spazio di Fourier. Consideriamo perciò una successione di funzioni d'onda* la cui trasformata di Fourier *sia data da*

$$\phi_n(p) = \begin{cases} 0 & \textit{per } |p-\lambda| > \frac{1}{2}n^{-2} \\ n & \textit{per } |p-\lambda| < \frac{1}{2}n^{-2} \end{cases}, \ (n = 1, 2, \ldots).$$

Dato che l'espressione $\|\phi_n\|^2$ *assume la stessa forma come nel problema precedente nella coordinata momento, si otterranno le medesime conclusioni. Una funzione d'onda la cui trasformata di Fourier è del tipo* ϕ_n*, cioè a supporto finito, costituisce un'approssimazione fisicamente ragionevole ad un'onda piana.*

Anziché utilizzare le successioni di funzioni a quadrato sommabile (dette anche "auto-pacchetti-d'onda"), risulta più agevole introdurre delle **autofunzioni generalizzate**; questi oggetti non sono vettori nello spazio di Hilbert ma permettono manipolazioni formali molto simili a quelle che si operano sui vettori di una base ortonormale. La loro applicazione sistematica risale a **Dirac** [**Dir59**]. Supponiamo di normalizzare le funzioni della successione definita nella soluzione del Probl. 5.2-9 in modo differente:

$$\psi_n(x,\lambda) = \begin{cases} 0 & \text{per } |x-\lambda| > \frac{1}{2}n^{-1} \\ n & \text{per } |x-\lambda| < \frac{1}{2}n^{-1} \end{cases} \tag{5.53}$$

e chiameremo la "funzione" definita dal limite $n \to \infty$ un'autofunzione generalizzata di q. Qual è il prodotto scalare tra due autofunzioni generalizzate? Il prodotto scalare $\langle n, \lambda | n, \mu \rangle$ si calcola facilmente nel limite $n \to \infty$: infatti se $\lambda \neq \mu$ per n sufficientemente grande le due autofunzioni sono diverse da zero in due intervalli disgiunti e pertanto il loro prodotto scalare si annulla. Dunque si ha

$$\langle \lambda | \mu \rangle = 0, \text{ per } \lambda \neq \mu \tag{5.54}$$

D'altra parte possiamo facilmente calcolare l'integrale (omettendo i limiti in quanto si tratta di tutte integrazioni estese all'intero asse reale)

$$\int d\lambda\, \langle n, \lambda | n, \mu \rangle = \int d\lambda \int dx\, n^2\, \theta\left(|x-\lambda| < \tfrac{1}{2n}\right) \theta\left(|x-\mu| < \tfrac{1}{2n}\right) .$$

Invertendo l'ordine di integrazione si ottiene $\int d\lambda\, \langle n, \lambda | n, \mu \rangle = 1$. Troviamo perciò che il prodotto scalare $\langle \lambda | \mu \rangle$ possiede giusto le caratteristiche della distribuzione di Dirac $\delta(\lambda - \mu)$ (vedi l'App. B.5). Procederemo dunque nell'assunzione che questa proprietà delle autofunzioni generalizzate dell'operatore q si possa estendere anche al caso dello spettro continuo di tutti gli altri operatori autoaggiunti. Il caso dell'operatore momento p ci porta a definire, come in precedenza,

$$p u_p(x) = p u_p(x),\ u_p(x) = \mathcal{N} \exp(ipx/\hbar), \tag{5.55}$$

in corrispondenza ad ogni p reale. Ovviamente le onde piane non appartengono allo spazio di Hilbert. La normalizzazione corretta si trova considerando la nota relazione

$$\frac{1}{2\pi} \int e^{ixy} dx = \delta(y) \tag{5.56}$$

il che impone $\mathcal{N} = (2\pi\hbar)^{-1/2}$. Schematizzando si può asserire che le formule di algebra vettoriale utilizzate nella descrizione di vettori in termini di una base ortonormale si trasferiscono allo spettro continuo in termini delle basi di autovettori generalizzati sostituendo la δ di Dirac alla δ di Kronecker.

PROBLEMA 5.2-11 []Si determini lo spettro e le autofunzioni dell'operatore autoaggiunto $\mathcal{D} = \frac{1}{2}(pq + qp)$.

SOLUZIONE *[]Innanzitutto $\mathcal{D}$ conserva la parità delle funzioni d'onda, cioè se $\psi(-x) = \pm\psi(x)$ allora anche $\mathcal{D}\psi(-x) = \pm\mathcal{D}\psi(x)$. Possiamo perciò restringere $\mathcal{D}$ allo spazio delle funzioni a parità definita. Consideriamo innanzitutto le funzioni* pari, *tali cioè che $\psi(-x) = \psi(x)$. Se introduciamo la coordinata $\rho = \log|x|$ scopriamo che*

$$\int_0^\infty |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^\infty |\psi(e^\rho)|^2 e^\rho\, d\rho$$

e conviene perciò stabilire la corrispondenza

$$\tau:\ \psi(x) = \phi(\rho)\, \exp\{-\tfrac{1}{2}\rho\}$$

che permette di mettere in relazione $\mathcal{D}$ con l'operatore p. Risulta infatti:

$$\|\psi\|^2 = \int |\psi(x)|^2 dx = \int |\phi(\rho)|^2 d\rho$$

e l'azione dell'operatore è esattamente la stessa:

$$\begin{array}{ccc} \psi & \xrightarrow[\mathcal{D}]{} & -i\frac{1}{2}\hbar(q\frac{d}{dq}+\frac{d}{dq}q)\psi \\ \tau\Big\downarrow & & \tau\Big\downarrow \\ \phi & \xrightarrow[\mathfrak{p}]{} & -i\hbar\frac{d}{d\rho}\phi \end{array}$$

Ne segue che lo spettro di $\mathcal{D}$ è continuo e le sue autofunzioni generalizzate sono date da

$$u_\lambda(x) = \frac{e^{i\lambda\rho}}{2\pi\hbar x} = \frac{|x|^{i\lambda-\frac{1}{2}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

Così come le autofunzioni generalizzate di $\mathfrak{p}$ forniscono una base per rappresentare funzioni di $\mathcal{L}_2$ in termini di integrale di Fourier, le autofunzioni generalizzate di $\mathcal{D}$ offrono una rappresentazione del tipo

$$\psi(x) = \int d\lambda\, \sigma(\lambda)\, |x|^{i\lambda-\frac{1}{2}}$$

che viene detta trasformata di Mellin (vedi [**BRS93, Hoc71**]*). Il caso antisimmetrico si tratta in modo analogo.*

5.2.8. La rappresentazione dei momenti. Abbiamo già fatto uso della trasformata di Fourier per risolvere alcuni problemi. In effetti l'equazione di Schroedinger si può interamente riformulare in termini della funzione $\phi(\mathbf{p})$ definita da

$$\phi(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3x\, e^{-i\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}/\hbar}\psi(\mathbf{x}). \tag{5.57}$$

Dal punto di vista della meccanica quantistica, che svilupperemo nel cap. 7, questa descrizione equivale a cambiare sistema di riferimento nello spazio degli stati fisici e adottare la base degli autovettori del momento lineare. Si noti che a rigore l'integrale di Fourier è ben definito solo per funzioni che siano oltre che a quadrato sommabile anche a modulo sommabile (cioè $\psi \in \mathcal{L}_1 \cap \mathcal{L}_2$). Tuttavia dato che la trasformata di Fourier definisce un operatore isometrico, dunque limitato, essa risulta *estendibile per continuità a tutto $\mathcal{L}_2$*.

Impiegheremo nel seguito il simbolo $\phi = \mathcal{F}(\psi)$. L'operatore $\mathcal{F}$ presenta notevoli proprietà di cui faremo spesso uso:

a) $\|\mathcal{F}\psi\| = \|\psi\|$ (identità di Parseval, $\mathcal{F}$ è un operatore unitario).
b) $\mathcal{F}^2 = \mathcal{P}$, essendo $\mathcal{P}$ l'operatore di **parità**, definito da $\mathcal{P}\psi(x) = \psi(-x)$.
c) $\mathcal{F}^4 = \mathbf{1}$.

La seconda proprietà implica che la formula di inversione è data dalla stessa formula integrale a meno di un cambiamento di segno nell'esponente:

$$\psi(\mathbf{x}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3p\, e^{i\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}/\hbar}\phi(\mathbf{p})\,. \tag{5.58}$$

L'ultima identità ci informa che l'operatore $\mathcal{F}$ *ha uno spettro che consiste nei soli quattro punti* $\{1, i, -1, -i\}$, le radici quarte dell'unità.

La rappresentazione dei momenti risulta talvolta conveniente; bisogna tenere presente che si deve trasformare l'Hamiltoniano inserendo gli operatori canonici[16]

$$\begin{cases} q\phi(p) = i\hbar\dfrac{d}{dp}\phi(p) \\ p\phi(p) = p\phi(p) \end{cases} \tag{5.59}$$

e perciò l'equazione che si ottiene potrà essere di difficile interpretazione nel caso in cui il potenziale non sia un polinomio nella coordinata q. In generale infatti si avrà che l'equazione di Schroedinger assume la forma di un'equazione integrale

$$\frac{p^2}{2m}\phi(\mathbf{p}) + \int d^3p\, \mathcal{V}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\,\phi(\mathbf{p}') = E\phi(\mathbf{p}) \tag{5.60}$$

dove il **nucleo integrale** $\mathcal{V}$ è definito da

$$\mathcal{V}(\xi) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3q\, e^{i\xi\cdot x/\hbar}V(\mathbf{x})$$

Vedremo che questa formulazione è molto conveniente nella trattazione dei processi di urto tra particelle.

5.3. La funzione di Green

La soluzione del problema spettrale, la determinazione cioè delle autofunzioni e degli autovalori dell'Hamiltoniano, permette di risolvere in modo generale l'equazione di Schroedinger dipendente dal tempo. Consideriamo per semplicità il caso di spettro interamente discreto. Nota la funzione d'onda ad un istante iniziale $t = 0$, *si potrà scrivere* Track 2

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sum_n c_n\, u_n(\mathbf{x})\, e^{-iE_n t/\hbar}$$
$$\psi(\mathbf{x}, 0) = \sum_n c_n\, u_n(\mathbf{x})\,.$$

[16] Si noti che siamo in presenza di un caso particolare del teorema di Von Neumann, la trasformazione unitaria essendo realizzata da $\mathcal{F}$.

Dalle relazioni di ortogonalità si ottiene d'altronde

$$\int d^3x\, \overline{u_m(x)}\, \psi(x,0) = \sum_n c_n \int d^3x\, \overline{u_m(x)}\, u_n(x)$$
$$= \sum_n \delta_{nm}\, c_n = c_m$$

e pertanto

$$\psi(x,t) = \sum_n \int d^3x' \overline{u_n(x')}\, \psi(x',0)\, u_n(x)\, e^{-iE_n t/\hbar}\,.$$

Invertendo l'operazione di integrazione con la somma della serie si può allora esprimere la soluzione nella forma compatta

$$\psi(x,t) = \int d^3x'\, G(x,x',t)\, \psi(x',0)\,, \tag{5.61}$$

con

$$G(x,x',t) = \sum_n u_n(x)\overline{u_n(x')}\, e^{-iE_n t/\hbar}\,. \tag{5.62}$$

La funzione G *è nota come* **funzione di Green**. *Nel caso generale si deve includere un termine di integrale sullo spettro continuo. Data cioè la decomposizione spettrale dell'Hamiltoniano* (5.51) *si avrà*

$$G(x,x',t) = \int d\hat{E}_\lambda(x,x')\, e^{-i\lambda t/\hbar} \tag{5.63}$$

essendo $\hat{E}_\lambda(x,x')$ *il nucleo integrale che rappresenta l'operatore di proiezione* $\hat{E}_\lambda$*:*

$$\hat{E}_\lambda\, \psi(x) = \int d^3x'\, \hat{E}_\lambda(x,x')\, \psi(x')\,.$$

PROBLEMA 5.3-12 []Dimostrare che la funzione di Green soddisfa l'equazione di Schroedinger (rispetto al primo argomento) con la condizione iniziale $G(x,x',0) = \delta(x-x')$.

Green

Alla funzione di Green $G(x,x',t)$ *possiamo riconoscere il seguente significato fisico: assumiamo che la funzione d'onda al tempo* $t = 0$ *sia concentrata in una regione attorno al punto* $x = x_0$*. Allora la funzione d'onda al tempo* t*, e quindi l'ampiezza di probabilità di rivelare la particella in* x *al tempo* t *è data da* $G(x,x_0,t)$*. Da qui l'altro termine "propagatore", talora assegnato alla funzione* G*. Si verifica facilmente che la funzione di Green soddisfa del tutto in generale un'identità che assume un evidente significato proprio alla luce di quanto appena detto:*

$$\int d^3x''\, G(x,x'',t_1)\, G(x'',x',t_2) = G(x,x',t_1+t_2)\,, \tag{5.64}$$

che si interpreta nel senso che l'ampiezza di probabilità della propagazione da x' *a* x *si ottiene moltiplicando l'ampiezza di probabilità di propagazione da* x' *ad un punto intermedio* x'' *per l'ampiezza da* x'' *al punto*

finale $\mathbf{x}$ *e integrando su tutti i valori di* $\mathbf{x}''$. *Se consideriamo un fenomeno dinamico aleatorio, quale il moto browniano, la stessa legge di composizione è soddisfatta dalla* densità di probabilità di transizione *(si veda* [**PR69**]*). In questo fatto risiede la radicale differenza tra la dinamica descritta dall'equazione di Schroedinger e quella dei cosiddetti processi stocastici (diffusivi). Avremo occasione di utilizzare la funzione* G *in connessione con la formulazione di Feynman della meccanica quantistica.*

PROBLEMA 5.3-13 [] Determinare la funzione di Green per l'equazione di Schroedinger della particella libera.

SOLUZIONE *[]Dalla definizione si ha*

$$G(\mathbf{x},\mathbf{x}',t) = (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3p \, \exp\left\{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar - ip^2t/2m\hbar\right\} .$$

L'integrale si valuta con la formula di Gauss (vedi l'App. B.7.1) e dà

$$G(\mathbf{x},\mathbf{x}',t) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \exp\left\{im\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{x}')^2}{2\hbar t}\right\} . \tag{5.65}$$

5.4. Valori di aspettazione e osservabili fisiche

Se $\rho = |\psi|^2$ ci offre la densità di probabilità per la posizione della particella, possiamo valutare il valore medio a priori della misura di qualunque funzione $f(\mathbf{q})$ della posizione Track 1

$$\langle f(\mathbf{q})\rangle = \int d^3x \, f(\mathbf{x}) \, |\psi(\mathbf{x})|^2 ,$$

avendo assunto che la funzione d'onda sia normalizzata. In generale si dovranno considerare anche grandezze osservabili che dipendono dal momento lineare (energia, momento lineare e angolare). Adotteremo l'ipotesi di lavoro secondo cui *la funzione d'onda contiene già tutte le informazioni necessarie per una descrizione statistica di tutte le osservabili.* Si tratta di determinare perciò la forma che assume la distribuzione di probabilità per ogni data osservabile. Consideriamo innanzitutto il momento lineare. Sappiamo dalla relazione di De Broglie che ad un'onda piana è associato un valore preciso del momento lineare; ad una generica funzione d'onda, esprimibile come sovrapposizione di onde piane secondo l'Eq. (5.58), non corrisponderà invece un valore definito del momento; potremo tuttavia identificare nella trasformata di Fourier $\phi(\mathbf{p})$ *l'ampiezza di probabilità relativa al momento lineare*: assumeremo cioè che *la probabilità di determinare un valore del momento lineare in un volume elementare* d^3p sia data da $|\phi(\mathbf{p})|^2 \, d^3p$. Questa idea risulta del tutto naturale alla luce dei fatti seguenti:

i) se ψ è normalizzata tale risulta anche ϕ, grazie alle proprietà della trasformata di Fourier.

ii) Il valore medio del momento risulta

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int d^3p\, |\phi(\mathbf{p})|^2 \mathbf{p} = \int d^3x \overline{\psi(\mathbf{x})}(-i\hbar\nabla)\psi(\mathbf{x})$$

e dunque è esprimibile direttamente in termini della funzione d'onda e dell'operatore che abbiamo associato al momento lineare (si veda l'Eq. (5.25)).
iii) La distribuzione di probabilità $|\phi|^2$ è suggerita dalla stessa equazione di Schroedinger in base ad una descrizione dettagliata della misura del momento (si veda il Probl. 5.4-14 a p. 111).

Una generalizzazione di questo schema si può formulare come suggerito da Dirac e costituisce la base assiomatica della nuova meccanica (tra parentesi il caso del momento lineare) :
a) ad ogni grandezza fisica $\mathcal{O}$ si associa un operatore lineare autoaggiunto ($p \to -i\hbar\nabla$);
b) la funzione d'onda è esprimibile come sovrapposizione lineare di autofunzioni di $\mathcal{O}$

$$\psi(\mathbf{x}) = \int d\lambda\, \phi_\lambda\, \chi_\lambda(\mathbf{x})$$

definite dall'equazione $\mathcal{O}\chi_\lambda = \lambda\chi_\lambda$ (onde piane e integrale di Fourier);
c) gli autovalori λ costituiscono i possibili valori che risultano da una misura di $\mathcal{O}$ e la relativa distribuzione di probabilità è data dal modulo quadro della ampiezza ϕ_λ;
d) il valore medio di $\mathcal{O}$ è dato dalle due espressioni equivalenti

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \int d\lambda\, \lambda\, |\phi_\lambda|^2 = \int d^3x\, \overline{\psi}(\mathbf{x})\, \mathcal{O}\psi(\mathbf{x})$$

Quest'ultima proprietà si dimostra tenendo conto che per operatori autoaggiunti le autofunzioni sono ortogonali:

$$\int d^3x\, \overline{\chi_\lambda}\, \chi_{\lambda'} = \delta(\lambda - \lambda')\,.$$

Si ha infatti

$$\begin{aligned}\int d^3x\, \overline{\psi}(\mathbf{x})\, \mathcal{O}\, \psi(\mathbf{x}) &= \int d^3x \int d\lambda\, \overline{\phi_\lambda\, \chi_\lambda(\mathbf{x})}\mathcal{O} \int d\lambda'\, \phi_{\lambda'}\chi_{\lambda'}(\mathbf{x}) \\ &= \iint d\lambda\, d\lambda'\, \lambda'\, \overline{\phi_{\lambda'}}\, \phi_\lambda\, \delta(\lambda - \lambda') \\ &= \int d\lambda\, \lambda\, |\phi_\lambda|^2\end{aligned}$$

Si noti che in queste formule il parametro λ che rappresenta l'autovalore di $\mathcal{O}$ potrà in generale assumere valori in un insieme parzialmente continuo o discreto e quindi il simbolo di integrale sottintende un'eventuale sommatoria sullo spettro discreto. Questo schema verrà sviluppato in dettaglio nel cap. 7.

PROBLEMA 5.4-14 [] Valutare il momento lineare di una particella in termini di tempo di volo tra due traguardi e dedurre la relativa distribuzione di probabilità.

SOLUZIONE *[]Sia* $\psi(x,t)$ *la soluzione dell'equazione di Schroedinger. Assumeremo di disporre di rivelatori di particelle da sistemare nella posizione desiderata. Per misurare il momento lineare la particella deve essere isolata da campi di forza esterni. Quindi la soluzione è quella della particella libera (ci riduciamo al caso di una dimensione per semplicità di notazione, ma l'argomento si può ripetere più in generale)*

$$\psi(x,t) = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}} \int dp\, \phi(p)\, \exp\{ixp/\hbar - ip^2 t/2m\hbar\}\,.$$

Se misuriamo il tempo necessario per percorrere un tratto L *assegneremo alla particella una velocità* L/t. *La funzione d'onda al tempo* t *nel punto* $x = vt$ *si può stimare con il metodo della fase stazionaria (si veda l'App. B.2) e si ottiene*

$$\psi(vt,t) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{2\pi i m\hbar}{t}}\, \phi(mv)\, \exp\{imv^2 t/2\hbar\}$$

e dunque $|\psi(vt,t)|^2 \approx m|\phi(mv)|^2/t$. *Dato che la probabilità di trovare un momento compreso tra* $p = mv$ *e* $p = mv + dp$ *è data dalla probabilità di trovare la particella tra* $x = vt$ *e* $x = (v + dp/m)t$, *il fattore* m/t *viene riassorbito e il risultato è proprio* $|\phi(p)|^2$.

5.4.1. Relazioni di indeterminazione. Abbiamo già osservato che le condizioni di quantizzazione di Bohr corrispondono all'idea che ad ogni stato fisico per un sistema a n gradi di libertà corrisponda un volume minimo nello spazio delle fasi pari a h^n. Questo fatto è stato interpretato da Heisenberg in termini di una limitazione intrinseca alla precisione con cui è possibile misurare contemporaneamente posizione e impulso[17]. Mostriamo ora come lo schema interpretativo introdotto nelle pagine precedenti contenga implicitamente questo principio, noto come **principio di Heisenberg** o *principio di indeterminazione*. Detta al solito $\psi(x)$ la funzione d'onda (normalizzata), la deviazione standard della misura di posizione è data da

$$\Delta^2 q = \langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2 = \int dx\, x^2 |\psi(x)|^2 - \langle q \rangle^2$$

mentre la deviazione standard del momento lineare sarà data da

$$\Delta^2 p = \int dx\, \overline{\psi(x)} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}\right) \psi(x) - \langle p \rangle^2 = \int dx\, \hbar^2 |\psi'(x)|^2 - \langle p \rangle^2\,.$$

[17] Senza mancare di rispetto a un grande maestro, può essere divertente ricordare che solo nel 1923 Heisenberg si rese conto dell'importanza da annettere all'analisi degli errori sperimentali; durante il suo esame di dottorato rischiò infatti una solenne bocciatura non sapendo rispondere alle domande che Wien gli pose riguardo il potere risolutivo di un microscopio (vedi [**MR82**], vol. 2, cap. I.8.)

Possiamo limitarci, senza perdita di generalità, al caso in cui $\langle q \rangle = \langle p \rangle = 0$, in quanto questa situazione può essere sempre realizzata traslando l'asse delle coordinate e dei momenti. Si consideri ora la disuguaglianza

$$\begin{aligned} 0 &\le \int \left| x\psi(x) + \alpha\hbar\psi'(x) \right|^2 \, dx \\ &= \Delta^2 q + |\alpha|^2 \Delta^2 p + 2\,\Re\mathfrak{e} \int \alpha\hbar x \overline{\psi}\, \psi' \, dx \\ &= \left| \alpha\sqrt{\Delta^2 p} + \frac{\hbar}{\sqrt{\Delta^2 p}} \int x\overline{\psi'}\psi \, dx \right|^2 + \Delta^2 q - \frac{\hbar^2}{\Delta^2 p} \left| \int x\overline{\psi}\psi' \, dx \right|^2 . \end{aligned}$$

Scegliendo α si può azzerare il primo termine quadratico e ottenere

$$\Delta^2 q \, \Delta^2 p \ge \hbar^2 \left| \int x\overline{\psi}\psi' \, dx \right|^2 .$$

La grandezza di destra è senza'altro maggiore di $\hbar^2 (\Re\mathfrak{e} \int x\overline{\psi}\psi' \, dx)^2$ ossia

$$\Delta^2 q \, \Delta^2 p \ge \tfrac{1}{4}\hbar^2 \left(\int (x\overline{\psi}\psi' + x\overline{\psi'}\psi) \, dx \right)^2 = \tfrac{1}{4}\hbar^2 ,$$

avendo integrato per parti. Segue la disuguaglianza di Heisenberg

$$\boxed{\Delta q \, \Delta p \ge \tfrac{1}{2}\hbar} \tag{5.66}$$

Una trattazione dettagliata dei principi fisici su cui si fonda questo risultato si trova in [**Hei63**].

PROBLEMA 5.4-15 []Determinare gli stati (detti *pacchetti d'onda minimali*) per i quali si realizza il minimo valore del prodotto delle indeterminazioni $\Delta q \, \Delta p = \frac{1}{2}\hbar$.

PROBLEMA 5.4-16 []Dimostrare per operatori canonici q_i, p_i, $(i = 1, 2, \ldots, n)$ vale la disuguaglianza

$$\left\langle \sum q_i^2 \right\rangle \left\langle \sum p_i^2 \right\rangle \ge \frac{n^2}{4}\hbar^2$$

PROBLEMA 5.4-17 [] *Trovare il difetto logico del seguente argomento*, talvolta invocato per suggerire che l'atomo di idrogeno è stabile grazie al principio di Heisenberg:

Dalle relazioni di indeterminazione segue $\left\langle \mathbf{p}^2 \right\rangle \left\langle \mathbf{x}^2 \right\rangle \ge \frac{9}{4}\hbar^2$; *e quindi*

$$H = \mathbf{p}^2/2m - e^2/r \ge \left\langle \mathbf{p}^2 \right\rangle /2m - e^2/\Delta r \ge -\frac{4}{9}\frac{me^4}{2\hbar^2}$$

come si trova determinando il minimo rispetto a $\Delta r \equiv \sqrt{\langle \mathbf{x}^2 \rangle}$. In effetti l'energia dello stato fondamentale è riprodotta a meno del fattore 4/9. Dove sta il passaggio scorretto?

SOLUZIONE *[]L'argomento applica una disuguaglianza che in realtà non sussiste; infatti si fa uso di* $\Delta(1/r) \leq 1/\Delta r$*, mentre la disuguaglianza di Jensen afferma giusto il contrario! Si veda* [**Lie76**] *per una forma più forte del principio di Heisenberg che supera la difficoltà. Vedi anche il Probl. 10.3-12*

CAPITOLO 6

Applicazioni elementari

Lo studio dell'equazione di Schroedinger per sistemi fisici realistici, quali un atomo a più elettroni o anche la molecola più semplice, non si presta ad una soluzione in forma analitica. Tuttavia, al fine di applicare metodi di soluzione approssimata, è spesso necessario basare la trattazione su un modello semplificato esattamente solubile. Risulta pertanto utile studiare sistemi ultra-semplificati quali blocchi costituenti di sistemi più complessi. Attraverso la separazione delle variabili ci si può spesso ricondurre al caso di un singolo grado di libertà, che ora studieremo in qualche dettaglio.

6.1. Sistemi a un grado di libertà

6.1.1. Proprietà generali delle soluzioni. L'equazione stazionaria in un grado di libertà Track 1

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\,\psi(x) = E\,\psi(x)$$

gode di alcune proprietà notevoli per il fatto di essere un'equazione differenziale lineare omogenea del secondo ordine. Innanzitutto, sotto ipotesi alquanto generali sulla funzione $V(x)$, esiste la soluzione generale nella forma

$$\psi(x) = Au(x,E) + Bv(x,E)\,,$$

u e v essendo una coppia di soluzioni linearmente indipendenti. Ad esempio si può scegliere

$$\begin{cases} u(0,E) = 1\,, & u'(0,E) = 0 \\ v(0,E) = 0\,, & v'(0,E) = 1\,. \end{cases}$$

Si tratta poi di determinare A, B ed E in modo da soddisfare opportune condizioni al contorno e la sommabilità di $|\psi|^2$ per il caso degli stati legati. Una proprietà importante è rappresentata dal teorema di Wronski, che si traduce nel fatto che la quantità $u'(x,E)\,v(x,E) - u(x,E)\,v'(x,E)$, detta "il Wronskiano di u e v", è costante rispetto ad x. Ciò ha come immediate conseguenze che *i*) se due soluzioni si annullano nello stesso

punto esse sono linearmente dipendenti, *ii*) è sufficiente conoscere una soluzione per costruirne un'altra linearmente indipendente con una semplice quadratura:

$$u v' - u' v = 1 \longrightarrow v(x) = u(x) \int_0^x \frac{dy}{u(y)^2} \,. \tag{6.1}$$

Alcune proprietà qualitative delle soluzioni sono immediatamente evidenti dalla equazione stessa. Da

$$\frac{\psi''}{\psi} = \frac{2m}{\hbar^2}\,(V(x) - E)$$

segue che una soluzione reale ha carattere oscillatorio nella regione in cui $V(x) < E$, in quanto la funzione e la sua derivata seconda hanno segno opposto. Si può anzi mostrare [**Tri70**] che, indicato con $T_{\max}$ il massimo valore di $E - V(x)$ in un'arbitraria regione (a, b), e con $T_{\min}$ il minimo, la distanza δ tra due zeri successivi della funzione d'onda soddisfa la diseguaglianza

$$\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mT_{\max}}} \le 2\delta \le \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mT_{\min}}} \,. \tag{6.2}$$

Questo teorema matematico estende la relazione di De Broglie alle onde stazionarie.

PROBLEMA 6.1-1 []Dimostrare che le autofunzioni dello spettro discreto per un sistema ad un grado di libertà sono non-degeneri (si assuma che il potenziale $V(x)$ sia continuo a tratti e limitato).

SOLUZIONE *[]Sia $W = u v' - u' v$ il Wronskiano delle due autofunzioni a quadrato sommabile. È noto che W è costante e dunque possiamo valutarlo per $x \to \infty$ dove sappiamo che entrambe le autofunzioni devono tendere a zero. Sarà perciò $W = 0$ e pertanto u e v sono linearmente dipendenti. Una dimostrazione più esplicita è la seguente: data una soluzione a quadrato sommabile $u(x)$ una qualunque altra soluzione $v(x)$ deve soddisfare la relazione del Wronskiano $u v' - u' v = C$, con C costante. Sia x_0 il più grande valore di x per cui $E = V(x)$ (punto di inversione del moto classico). Si ha perciò, indicando con A una costante arbitraria,*

$$v(x) = Au(x) + Cu(x) \int_{x_0}^x \frac{dy}{u(y)^2} = Au(x) + Cu(x)^{-1} \int_{x_0}^x \frac{u(x)^2}{u(y)^2} dy \,,$$

ma l'integrale cresce più rapidamente di $(x - x_0)$ in quanto $u(x)$ risulta monotona decrescente per $x > x_0$, il che implica che $v(x)$ diverge per $x \to \infty$, a meno che sia $C = 0$ e dunque $v \propto u$.

6.1.2. Potenziali costanti a tratti. I casi più semplici in cui si risolvono i problemi di ottica geometrica sono quelli in cui l'indice di rifrazione è costante a tratti, varia cioè solo sulle superfici di separazione

tra un mezzo trasparente e l'altro. In modo analogo i problemi più semplici in meccanica ondulatoria sono quelli in cui il potenziale è costante a tratti, schematizzando così una situazione in cui il campo di forze è nullo tranne che sulle superfici di separazione tra le varie regioni di potenziale costante. Per sistemi a un grado di libertà l'equazione di Schroedinger diventa semplicemente

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_i''(x) + V_i(x)\psi_i(x) = E\psi_i(x), \ (i = 1, 2, \ldots)$$

dove si è supposto che il potenziale assuma il valore costante V_i negli intervalli $(x_i < x < x_{i+1})$. Cominciamo a studiare un caso tra i più semplici

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| > L/2 \\ V_1 & |x| < L/2 \end{cases},$$

cui ci riferiremo come a una *buca di potenziale* se $V_1 < 0$ ovvero come a una *barriera di potenziale* nel caso opposto. L'equazione di Schroedinger si riduce a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x), \ |x| > L/2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V_1\psi(x) = E\psi(x), \ |x| < L/2$$

e la soluzione si trova allora con calcoli del tutto elementari (si tratta di equazioni lineari a coefficienti costanti). Il vero problema consiste nell'identificare le corrette condizioni di raccordo della soluzione tra un intervallo e l'altro. Sono possibili varie condizioni che corrispondono a una corretta definizione matematica dell'equazione, ma è la fisica a dettare quali condizioni al contorno siano quelle corrette. Se infatti consideriamo la discontinuità del potenziale come la schematizzazione di un potenziale a rapida variazione in un intervallo $(L/2 - \delta, L/2 + \delta)$, la stessa equazione ci suggerisce che

$$\begin{aligned}\psi'(L/2 + \delta) - \psi'(L/2 - \delta) &= \int_{L/2-\delta}^{L/2+\delta} \psi'' dx \\ &= \frac{2m}{\hbar^2}\int_{L/2-\delta}^{L/2+\delta} (E - V(x))\,\psi(x) dx\,,\end{aligned}$$

il che mostra che se $V(x)$ si mantiene limitato, al limite $\delta \to 0$ *la derivata della funzione d'onda deve essere continua* (vedremo più avanti l'esempio di un salto di potenziale infinito cui corrisponde una ψ' discontinua). Imporremo perciò in tutti i punti di discontinuità del potenziale un raccordo liscio per la funzione d'onda (ψ e ψ' continue). Dobbiamo ora discutere i vari intervalli possibili per E. Se $E < \min\{V(x)\}$ non si hanno soluzioni, per ragioni del tutto generali; in questo caso infatti l'operatore

$p^2/2m+V(q)-E$ è positivo definito, quindi invertibile e E appartiene all'insieme risolvente[1] di H. Consideriamo perciò il caso $V_1 < E < 0$. In questo regime la meccanica classica prevede un moto periodico (la particella rimbalza elasticamente tra due pareti). Risolvendo l'equazione troviamo

$$\psi(x) = \begin{cases} A\ \exp(\kappa x)\,, & x < -L/2 \\ B\ \cos kx + C \sin kx\,, & -L/2 < x < L/2 \\ D\ \exp(-\kappa x)\,, & x > L/2 \end{cases}$$

dove $k = \sqrt{2m(E-V_1)}/\hbar$, $\kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar$. Abbiamo già imposto che la funzione d'onda non sia divergente a grandi distanze (una soluzione $\exp(\kappa x)$, $x > L/2$, seppure matematicamente possibile, non avrebbe senso dal punto di vista fisico, in quanto corrisponderebbe ad una funzione d'onda concentrata a distanza infinita dall'origine). Le condizioni di continuità su ψ e ψ' danno in totale quattro equazioni lineari a cui assoggettare i coefficienti arbitrari A, B, C, D. Ciò porta ad un'equazione algebrica soddisfatta solo per certi valori di E. Troviamo perciò una componente di spettro discreto. Prima di avventurarci nel calcolo, sfruttiamo al meglio le proprietà di simmetria del problema: dal momento che il potenziale è simmetrico ($V(-x) = V(x)$), è chiaro che da una qualunque soluzione $\psi(x)$ possiamo ottenere un'altra soluzione dell'equazione per riflessione $\psi(-x)$. Ma essendo l'equazione lineare, anche le funzioni

$$\psi_s(x) = \tfrac{1}{2}(\psi(x) + \psi(-x))$$
$$\psi_a(x) = \tfrac{1}{2}(\psi(x) - \psi(-x))$$

saranno soluzioni e per di più di *parità definita*, cioè rispettivamente simmetrica e antisimmetrica. Nel nostro problema ciò significa che possiamo, senza perdere in generalità, considerare separatamente le soluzioni simmetriche da quelle antisimmetriche (in altri termini, l'Hamiltoniano e l'operatore di parità $\mathcal{P}$ ammettono una base di autofunzioni in comune). Questo fatto semplifica notevolmente il calcolo. Infatti si ha

$$\psi(x) = \begin{array}{ccc} \text{caso simmetrico} & \text{caso antisimmetrico} & \\ A\ \cos kx & A\ \sin kx & |x| < L/2 \\ C\ \exp(-\kappa x) & C\ \exp(-\kappa x) & x > L/2 \\ C\ \exp(\kappa x) & -C\ \exp(\kappa x) & x < -L/2 \end{array}.$$

L'*unica* condizione da imporre per determinare lo spettro discreto è pertanto la continuità in $x = L/2$, o, equivalentemente, la continuità della

[1] Dalla diseguaglianza $\|(H-E)\psi\| > (\min\{V\} - E)\|\psi\|$ segue che il risolvente $(H-E)^{-1}$ esiste come operatore limitato, e dunque E non appartiene allo spettro (si veda [**BRS93**]).

derivata logaritmica ψ'/ψ in quel punto. Otteniamo in questo modo

$$\begin{cases} k\tan(kL/2) = \kappa & \text{caso simmetrico} \\ k\cot(kL/2) = -\kappa & \text{caso antisimmetrico} \end{cases}$$

cui deve aggiungersi la relazione che proviene dalla definizione di k, κ:

$$k^2 + \kappa^2 = -2mV_1/\hbar^2 \,.$$

Si vede dunque che dette $\xi = kL/2$, $\eta = \kappa L/2$, il sistema si riduce a

$$\xi^2 + \eta^2 = 2m|V_1|(L/2\hbar)^2, \begin{cases} \xi\tan\xi = \eta & \text{caso simmetrico} \\ \xi\cot\xi = -\eta & \text{caso antisimmetrico} \end{cases} .$$

La soluzione è evidente dal punto di vista grafico, essendo data dalla intersezione della curva $\eta = \xi\tan\xi$ $(\eta = -\xi\cot\xi)$ con cerchi di raggio dipendente da $|V_1|$. La Fig. 6-1 mostra chiaramente che per $|V_1|$ molto piccolo esiste una sola soluzione che risulta essere simmetrica. Allorché la quantità $\sqrt{2m|V_1|/2}\, L/2\hbar$ raggiunge il valore $\frac{1}{2}\pi$ compare una soluzione antisimmetrica; all'aumentare della profondità della "buca di potenziale" il numero di livelli energetici con energia negativa (stati legati) aumenta in corrispondenza ai valori di soglia[2]

$$\sqrt{2m|V_1|}\, L/2\hbar = n\pi/2 \,. \tag{6.3}$$

Per $|V_1|$ molto grande il valore della ξ alle intersezioni tende ad assumere il valore $n\pi/2$ che corrisponde ai livelli di energia

$$E_n = V_1 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \,.$$

che coincidono con quelli previsti dalla vecchia teoria dei quanti.

Osserviamo che nel limite di profondità infinita le autofunzioni tendono uniformemente a zero al di fuori dell'intervallo $|x| < L/2$. Infatti dalla condizione di continuità in $x = L/2$ si ottiene immediatamente (nel caso simmetrico)

$$C = Ae^{\kappa L/2} \Big/ \sqrt{1 + (\kappa/k)^2}$$

e perciò la funzione d'onda nella regione $x \geq L/2$ è data da

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa(x-L/2)} \Big/ \sqrt{1 + (\kappa/k)^2} \,.$$

Ma nel limite $V_1 \to -\infty$, con $E - V_1$ fissato, si ha $\kappa/k \to \infty$ e pertanto la funzione d'onda tende a zero dappertutto, tranne che all'interno della buca di potenziale. *Teniamo presente perciò che nel caso di una barriera*

[2] Esistono stime generali relative al numero di stati legati in un potenziale. Si veda [**LSW76**] per una rassegna di risultati di questo tipo.

di potenziale infinitamente alta si dovranno applicare le condizioni al contorno $\psi(x) = 0$ *nel punto di discontinuità, mentre la derivata prima della funzione d'onda non è soggetta ad alcuna condizione.*

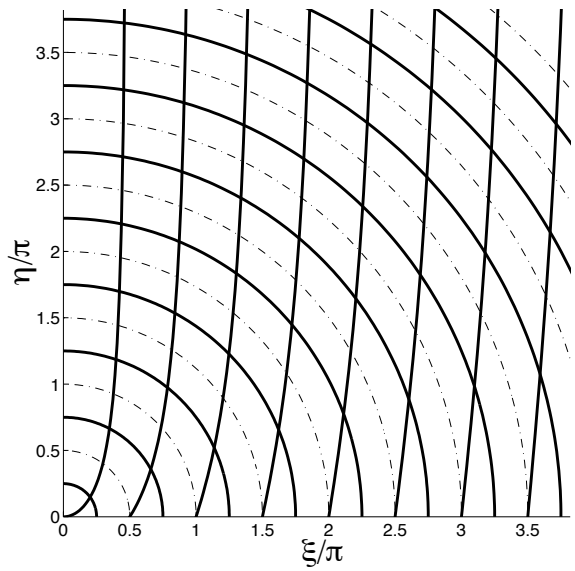


FIGURA 6-1. *Soluzione grafica dell'equazione agli autovalori per la buca di potenziale.*

PROBLEMA 6.1-2 []Determinare autostati e autofunzioni dell'equazione di Schroedinger per un potenziale della forma

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{per } |x| > a \\ 0 & \text{per } b < |x| < a \\ V_0 & \text{per } |x| < b \end{cases}$$

con a, b, V_0 costanti positive.

SOLUZIONE *[]L'interesse di questo esempio consiste nel fatto che in questo caso le soluzioni deviano sostanzialmente dalle aspettative basate sulla semplice analisi classica della dinamica della particella. Considerazioni alla Bohr danno per* $0 < V_0 < E$ *due possibilità. La particella si può trovare alla destra o alla sinistra della barriera centrale e l'invariante d'azione vale* $J = \oint p dx = 2(a-b)\sqrt{2mE}$. *Ciò farebbe prevedere stati di energia*

$$E_n \sim \frac{1}{2m}\left(\frac{(n+\frac{1}{2})\hbar\pi}{a-b}\right)^2$$

con due autofunzioni linearmente indipendenti corrispondenti ai due moti classici possibili. Procediamo ora alla soluzione dell'equazione di Schroedinger, facendo buon uso della simmetria che ci permette di cercare soluzioni simmetriche oppure antisimmetriche. Siano

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar, \ \kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar .$$

Si avrà

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin(k(x-a)) & \textit{per } b < x < a \\ B \cosh \kappa x & \textit{per } x < b, \textit{ caso simmetrico} \\ B \sinh \kappa x & \textit{per } x < b, \textit{ caso antisimmetrico}, \end{cases}$$

dove abbiamo utilizzato anche la condizione al contorno $\psi(\pm a) = 0$. *La condizione di raccordo in* $x = b$ *ci dà poi*

$$-k \cot(k(a-b)) = \begin{cases} \kappa \tanh(\kappa b) & \textit{caso simmetrico} \\ \kappa \coth(\kappa b) & \textit{caso antisimmetrico} \end{cases} .$$

Dato che $k^2 + \kappa^2 = 2mV_0/\hbar^2$ *conviene semplificare le formule introducendo* $\tau = \sqrt{2mV_0}(a-b)/\hbar$ *e una variabile* ω *in modo che risulti*

$$(a-b)k = \tau \sin \omega, \ (a-b)\kappa = \tau \cos \omega .$$

Si ottiene alla fine l'equazione che determina lo spettro

$$-\tan \omega \cot(\tau \sin \omega) = F\left(\frac{b\tau \cos \omega}{a-b}\right) , \tag{6.4}$$

dove F *è rispettivamente* $\tanh$ *o* $\coth$ *nei due casi. L'equazione deve essere risolta numericamente. Tuttavia in alcuni casi limite si può studiare analiticamente. Consideriamo il caso* $b \to \infty$ *con* $a - b = L$ *fissato. Al limite le due equazioni degenerano in una sola* $\tan \omega \cot(\tau \sin \omega) = -1$ *e vi saranno due stati (uno simmetrico e uno antisimmetrico) asintoticamente con la stessa energia. Si parla in questi casi di* **degenerazione asintotica**. *Per* b *grande ma finito ci sono ovviamente delle correzioni che si possono facilmente valutare. Sia* ϖ *una soluzione valida per* $b = \infty$ *e cerchiamo una soluzione approssimata del tipo* $\omega = \varpi + \varepsilon$. *Inserendo nell'equazione* (6.4) *e tenendo conto solo del termine più importante per* $b \to \infty$ *si trova:*

$$\tanh(b\tau \cos \omega/L) \sim 1 - 2e^{-2b\tau\varpi/L} \equiv 1 - 2\Theta$$
$$\coth(b\tau \cos \omega/L) \sim 1 + 2e^{-2b\tau\varpi/L} \equiv 1 + 2\Theta .$$

Si ha dunque

$$1 \mp 2\Theta \sim -\tan(\varpi + \varepsilon) \cot(\tau \sin(\varpi + \varepsilon))$$

e sviluppando al primo ordine in ε *si trova infine*

$$\varepsilon = \mp \frac{\Theta \sin(2\varpi)}{1 + \tau \cos \varpi} .$$

Si trova perciò che l'autofunzione simmetrica corrisponde ad un'energia più bassa di quella antisimmetrica *e la differenza di energia (in gergo, il "gap" di energia) vale approssimativamente*

$$\begin{aligned}\frac{\delta E}{E} &= \frac{2\delta k}{k} = 2\varepsilon \cot \varpi \\ &= 4\Theta \cos^2 \varpi/(1+\kappa L) \\ &= 4\frac{V_0 - E}{V_0(1+\kappa L)} \exp(-2b\kappa)\ ,\end{aligned}$$

dove il valore di E *che compare nell'equazione è quello corrispondente a* $b = \infty$. *Si noti che l'esponente* $2b\kappa$ *si può identificare con la quantità*

$$S = \int_{-b}^{b} \sqrt{2m(V_0 - E)}\,dx \equiv \int_{-b}^{b} |p(E,x)|\,dx$$

che rappresenta l'azione di una traiettoria a valori immaginari. *Questo è forse l'esempio più semplice di un fenomeno molto generale studiato a fondo in tempi relativamente recenti (teoria degli* **istantoni***). Si vedano a questo proposito* [**Col78, OSC79, CD88**].

PROBLEMA 6.1-3 []Determinare l'equazione degli autovalori dell'energia per il potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } |x| < b \\ -V_0 & \text{per } b < |x| < a \\ 0 & \text{per } a < |x| \end{cases}\ ,$$

con a, b, V_0 costanti positive, e dimostrare che anche in questo caso il gap di energia tra lo stato fondamentale e il primo livello eccitato è proporzionale a $\exp\{-S\}$, dove la funzione S è stata definita nel problema precedente.

PROBLEMA 6.1-4 []Si consideri una particella confinata ad una regione $-a < x < a$ non soggetta a forze. Determinare autovalori ed autofunzioni dell'energia; si applichi poi la relazione di ricorrenza (5.45) per ottenere i valori di aspettazione $\langle E_n | q^k | E_n \rangle$, k intero (tenere conto dei termini al contorno nell'integrazione per parti!).

6.1.3. Il caso di una forza costante. Consideriamo ora il problema di determinare le autofunzioni dell'equazione di Schroedinger per una particella soggetta ad un campo di forze costante e uniforme nello spazio (la trattazione matematica è la stessa sia che si tratti del campo di gravità o di un campo elettrico). Studieremo pertanto l'equazione di Schroedinger con $V(q) = mgq$. Dato che il potenziale è lineare in q risulta conveniente adottare la rappresentazione del momento lineare con la sostituzione $H(q,p) \to H(i\hbar\partial/\partial p, p)$; l'equazione si scrive allora:

$$\frac{p^2}{2m}\phi(p) + mg \cdot i\hbar\phi'(p) = E\phi(p)\ .$$

L'equazione è del primo ordine e si risolve per separazione delle variabili:

$$\frac{\phi'}{\phi} = \frac{2mE - p^2}{2i\hbar m^2 g} ,$$

da cui si ottiene

$$\phi(p) = \mathcal{N} \exp\left\{-i\frac{E}{mg\hbar}p + \frac{i}{6m^2 g\hbar}p^3\right\} .$$

Se desideriamo studiare la funzione d'onda nello spazio delle coordinate bisogna valutare la trasformata di Fourier; introducendo il parametro adimensionale $\xi = p/(2m^2 g\hbar)^{1/3}$ si ottiene

$$\psi(x) = \mathcal{N} \int d\xi \, \exp\left\{i\tfrac{1}{3}\xi^3 + i\xi \frac{mgx - E}{(2mg^2\hbar^2)^{1/3}}\right\} .$$

Questa funzione è nota come **funzione di Airy** (si veda la Fig. 6-2 a p. 124). Si noti come a differenti valori dell'energia *corrisponda sempre la stessa forma della soluzione a meno di una traslazione*: detta cioè $\Phi(x)$ la funzione di riferimento

$$\Phi(x) = \frac{1}{2\pi} \int d\xi \, \exp\left\{ix\xi + i\tfrac{1}{3}\xi^3\right\} ,$$

l'autofunzione è rappresentata da

$$\psi_E(x) = \mathcal{N}\, \Phi\left((m^2 g/2\hbar^2)^{1/3}(x - E/mg)\right) . \tag{6.5}$$

Il comportamento asintotico per $x \to \infty$ risulta essere

$$\Phi(x) \sim \begin{cases} \dfrac{1}{2\sqrt{\pi}x^{1/4}} \exp\{-\frac{2}{3}x^{3/2}\} & \text{per } x \to +\infty \\ \dfrac{1}{\sqrt{\pi}|x|^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}(-x)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] & \text{per } x \to -\infty. \end{cases} \tag{6.6}$$

Si vedano [**Pau58, Som64, Hoc71**] per una trattazione completa oppure si tentino di applicare le tecniche dell'App. B.2. Si noterà che nella regione $x > E/mg$ che secondo la meccanica classica è irraggiungibile per la particella, la funzione d'onda è monotona decrescente, e tende rapidamente a zero. Nell'altra zona, quella accessibile secondo la meccanica classica ($x < E/mg$), la funzione d'onda ha carattere oscillante con una distanza tra zeri successivi in accordo con la relazione di De Broglie.

PROBLEMA 6.1-5 []Si consideri il problema del potenziale lineare in cui però si abbia una barriera repulsiva infinitamente alta in $x = 0$.

SOLUZIONE *[]Adottando le notazioni del problema precedente, la soluzione dell'equazione di Schroedinger data dalla Eq.* (6.5) *deve soddisfare la condizione* $\psi_E(0) = 0$*, ovvero*

$$\Phi\left(-E/(mg^2\hbar^2/2)^{1/3}\right) = 0 .$$

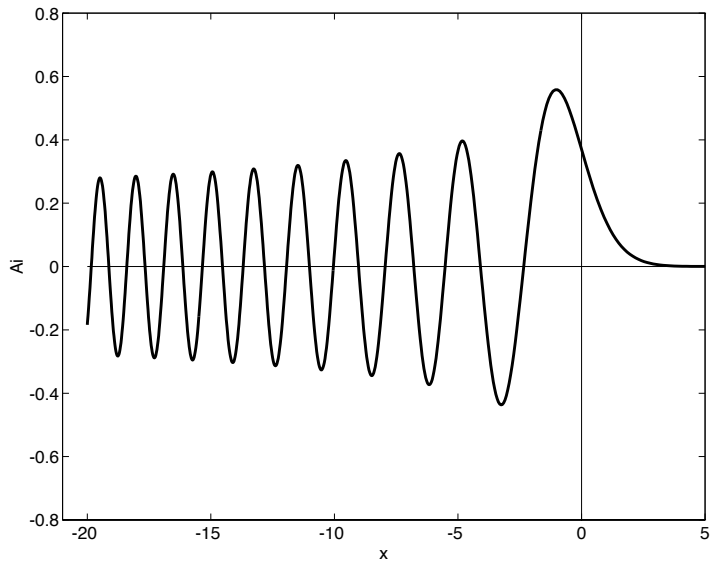


FIGURA 6-2. *La funzione di Airy.*

Se indichiamo con $-x_1, -x_2, \ldots$ *gli infiniti zeri reali negativi della funzione di Airy, i livelli di energia saranno dati dalla successione* $E_n = (mg^2\hbar^2/2)^{1/3}\, x_n$. *Una buona approssimazione agli zeri si ottiene applicando la rappresentazione asintotica* (6.6) *che ci dà*

$$x_n \sim (3(n - 1/4)\pi/2)^{\frac{2}{3}} \ .$$

Si può verificare facilmente che la quantizzazione alla Bohr riproduce lo stesso risultato, a meno della correzione finita $-1/4$ *che richiede un'analisi più raffinata (per maggiori dettagli si veda* [**Sak90**]*).*

6.2. L'oscillatore armonico

Track 1

Consideriamo ora la soluzione dell'equazione di Schroedinger per un potenziale quadratico $V \propto q^2$, che rappresenta in meccanica classica l'approssimazione di bassa energia per oscillazioni stabili. Il sistema è detto "oscillatore armonico" e, nonostante non corrisponda ad alcun sistema reale, è alla base di gran parte delle applicazioni sia come approssimazione di potenziali più realistici sia come base per la trattazione di sistemi a molte particelle. È perciò della massima importanza familiarizzarsi con le tecniche matematiche necessarie per il suo studio dettagliato.

L'equazione di Schroedinger si scrive, chiamando ω la frequenza

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi(x) = E\psi(x)\ .$$

Introduciamo una coordinata adimensionale sfruttando il fatto che la combinazione $\sqrt{\hbar/m\omega}$ ha le dimensioni di una lunghezza:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\xi\ .$$

Sostituendo nell'equazione si ottiene

$$-\tfrac{1}{2}\psi''(\xi) + \tfrac{1}{2}\xi^2\psi(\xi) = \varepsilon\psi\xi\ , \tag{6.7}$$

avendo indicato con ε il rapporto $E/\hbar\omega$, che dovrà risultare positivo in quanto *lo spettro dell'energia, del tutto in generale, è limitato dal di sotto dal minimo valore del potenziale.* Tentiamo una soluzione di forma gaussiana

$$\psi(\xi) = \mathcal{N}\exp\{-\alpha\xi^2\}\ .$$

Per sostituzione troviamo

$$\begin{aligned}\tfrac{1}{2}\psi'' + \tfrac{1}{2}\xi^2\psi &= \mathcal{N}\left(-2\alpha^2\xi^2 + \tfrac{1}{2}\xi^2 + \alpha\right)e^{-\alpha\xi^2}\\ &= \varepsilon\mathcal{N}e^{-\alpha\xi^2}\ .\end{aligned}$$

L'equazione è soddisfatta per $\alpha = \varepsilon = \frac{1}{2}$. L'autofunzione è diversa da zero dappertutto e questo indica che si tratta del modo fondamentale (energia minima) in modo del tutto analogo a quanto avviene per le vibrazioni di una corda elastica in cui il modo normale di frequenza più bassa è privo di "nodi"[3]. Per ottenere tutte le altre soluzioni e per dimostrare che abbiamo trovato proprio lo stato fondamentale procederemo in modo più sistematico.

6.2.1. Operatori di creazione e di annichilazione. Si definisca l'operatore lineare

$$a = \sqrt{\tfrac{1}{2}}\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right)\ ,$$

che ha come operatore coniugato Hermitiano

$$a^\dagger = \sqrt{\tfrac{1}{2}}\left(-\frac{d}{d\xi} + \xi\right)\ .$$

[3] Il numero di zeri (necessariamente semplici) per le autofunzioni dell'energia in un sistema a un grado di libertà si può identificare con il numero quantico della quantizzazione di Bohr. In particolare lo stato fondamentale è rappresentato da una funzione reale priva di zeri per tutti i sistemi con Hamiltoniano $H = -\triangle + V(\boldsymbol{x})$ – si veda [**RS78a**], § XIII.12.

Da un semplice calcolo risulta

$$\begin{aligned} a^\dagger a\psi &= \tfrac{1}{2}\left(-\frac{d}{d\xi}+\xi\right)\left(\frac{d}{d\xi}+\xi\right)\psi \\ &= \tfrac{1}{2}\left(-\left(\frac{d}{d\xi}\right)^2+\left[\xi,\frac{d}{d\xi}\right]+\xi^2\right)\psi \\ &= -\tfrac{1}{2}\psi''+\tfrac{1}{2}(\xi^2-1)\psi \end{aligned}$$

(abbiamo indicato con $[A,B] \equiv AB - BA$ il **commutatore** di due operatori). Dunque l'equazione agli autovalori si può scrivere nella forma

$$a^\dagger a\psi = (\varepsilon - \tfrac{1}{2})\psi \ .$$

Osserviamo però che l'operatore $a^\dagger a$ è *positivo* (*semi-*)*definito*: infatti il suo valore d'aspettazione su un arbitrario vettore è dato da

$$\langle\psi|\, a^\dagger a\,|\psi\rangle = \langle a\psi|\, a\psi\rangle \equiv \|a\psi\|^2 \geq 0 \ ,$$

e inoltre il limite inferiore zero è raggiunto solo se

$$a\psi = 0 \Longrightarrow \psi \equiv \psi_0 = \mathcal{N}\exp\{-\tfrac{1}{2}\xi^2\} \ .$$

Ciò implica che lo stato fondamentale è proprio dato dalla gaussiana già considerata in precedenza e $\varepsilon = \frac{1}{2}$ è l'autovalore più basso. Questo significa che il livello fondamentale dell'oscillatore armonico corrisponde ad un'energia $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$, che viene denominata **energia di punto zero**.

Osservazione *[]Il fondamento fisico che sta alla base di questa energia intrinseca dell'oscillatore sta nel* **principio di Heisenberg**. *Si ha infatti che per un qualunque stato* $|\psi\rangle$ *(in unità* $m = \omega = 1$*)*

$$\begin{aligned} \langle\psi|\, H\,|\psi\rangle &= \tfrac{1}{2}\,\langle\psi|\, p^2\,|\psi\rangle + \tfrac{1}{2}\,\langle\psi|\, q^2\,|\psi\rangle \\ &= \tfrac{1}{2}(\Delta^2 p + \Delta^2 q + \langle\psi|\, p\,|\psi\rangle^2 + \langle\psi|\, q\,|\psi\rangle^2) \\ &\geq \tfrac{1}{2}(\Delta^2 p + \Delta^2 q) \geq \tfrac{1}{2}(\Delta^2 p + \tfrac{1}{4}\hbar^2/\Delta^2 p) \ . \end{aligned}$$

Il minimo di quest'ultima espressione si valuta immediatamente considerando l'indeterminazione di p *come variabile indipendente e coincide con* $\frac{1}{2}\hbar$.

Gli operatori $a, a^\dagger$ soddisfano regole di commutazione proprie di un'**algebra di Lie** (vedi l'App. B.1). Troviamo infatti:

$$\begin{aligned} [a\,,\,a^\dagger] &= \tfrac{1}{2}\left[-\frac{d}{d\xi}+\xi\,,\,\frac{d}{d\xi}+\xi\right] = \mathbb{1} \\ [a^\dagger a\,,\,a^\dagger] &= a^\dagger[a\,,\,a^\dagger] = a^\dagger \\ [a^\dagger a\,,\,a] &= [a^\dagger\,,\,a]a = -a \ . \end{aligned}$$

Si noti che abbiamo fatto uso di una semplice identità che viene spesso in soccorso nel calcolo di commutatori:

$$[AB\,,\,C] \equiv A[B\,,\,C] + [A\,,\,C]B\ .$$

Vediamo ora come a partire dallo stato fondamentale, soluzione dell'equazione $a\psi_0 = 0$, possiamo costruire tutto lo spettro sfruttando la struttura algebrica. Consideriamo il vettore $\psi_1 = a^\dagger\psi_0$; si avrà

$$\begin{aligned} a^\dagger a\psi_1 &= a^\dagger a a^\dagger\psi_0 \\ &= a^\dagger(a^\dagger a + 1)\psi_0 \\ &= a^\dagger\psi_0 \equiv \psi_1\ . \end{aligned}$$

Abbiamo allora costruito un altro autovettore che soddisfa l'equazione

$$H\psi_1 = \tfrac{3}{2}\hbar\omega\psi_1\ .$$

Applicando più volte l'operatore $a^\dagger$ troviamo poi una successione di autovettori appartenenti ad autovalori via via più alti, la separazione tra i livelli essendo sempre $\hbar\omega$, come previsto dalla vecchia teoria dei quanti. Si può infatti procedere per ricorrenza nel modo seguente:
a) $H\psi_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega\psi_0$
b) se $H\psi_n = E_n\psi_n$ allora $Ha^\dagger\psi_n = (E_n + \hbar\omega)a^\dagger\psi_n$,
da cui concludiamo che lo spettro dell'Hamiltoniano *contiene* l'insieme

$$E_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2}),\ (n = 0, 1, 2, \ldots)\ .$$

Al fine di alleggerire la notazione da ogni elemento superfluo, si usa indicare con $|n\rangle$ l'autovettore normalizzato ψ_n.

PROBLEMA 6.2-6 []Determinare per ogni n la costante $\mathcal{N}_n$ tale che

$$|n\rangle = \mathcal{N}_n a^{\dagger n}|0\rangle$$

sia normalizzato.

SOLUZIONE *[]Si applicano ancora le regole di commutazione all'espressione*

$$\begin{aligned} 1 = \langle n|n\rangle &= |\mathcal{N}_n|^2\,\langle 0|\,a^n a^{\dagger n}\,|0\rangle \\ &= |\mathcal{N}_n|^2\,\langle 0|\,a^{n-1} a a^\dagger a^{\dagger n-1}\,|0\rangle \\ &= |\mathcal{N}_n|^2\,\langle 0|\,a^{n-1}(a^\dagger a + 1)a^{\dagger n-1}\,|0\rangle \end{aligned}$$

ma l'operatore $(a^\dagger a + 1)$ *è applicato ad un suo autovettore con autovalore* n *e pertanto*

$$1 = n|\mathcal{N}_n|^2\,\langle 0|\,a^{n-1}a^{\dagger n-1}\,|0\rangle = n|\mathcal{N}_n|^2/|\mathcal{N}_{n-1}|^2\ .$$

Si ha perciò

$$|N_n| = |N_{n-1}|/\sqrt{n} = \textit{(per ricorrenza)} = \frac{1}{\sqrt{n!}}\ ,$$

e l'azione di $(a, a^\dagger)$ *nella base degli autovettori dell'energia assume la forma particolarmente semplice*

$$\begin{aligned} a\,|n\rangle &= \sqrt{n}\,|n-1\rangle \\ a^\dagger\,|n\rangle &= \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \ . \end{aligned} \tag{6.8}$$

Gli operatori $(a^\dagger, a)$ assumono un'importanza notevole negli sviluppi della meccanica quantistica; sotto opportune generalizzazioni un'algebra quale quella generata da $\{H, a, a^\dagger, \mathbb{1}\}$ è alla base della fisica dei molti corpi e della teoria dei campi (vedi il §12.3). Si è coniato un nome particolare per questi operatori, $a^\dagger$ è detto un **operatore di creazione** (o *creatore*) mentre a è detto un **operatore di annichilazione**[4] (o *annichilatore*). La ragione è ovviamente che l'applicazione di $a^\dagger$ ad un autovettore dell'energia aumenta di un quanto $\hbar\omega$ l'energia mentre a la diminuisce di un quanto. L'operatore $\mathcal{N} = a^\dagger a$, in termini del quale l'Hamiltoniano si scrive $H = \hbar\omega(\mathcal{N} + \frac{1}{2})$, è noto quale "operatore numero", per il fatto ovvio che soddisfa l'equazione $\mathcal{N}\,|n\rangle = n\,|n\rangle$ e quindi "conta" il numero di quanti di uno stato. In termini degli operatori canonici (q, p) si ha (reinserendo le costanti fisiche appropriate)

$$\begin{aligned} a &= \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(p - im\omega q) \\ a^\dagger &= \frac{-i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(p + im\omega q) \ . \end{aligned}$$

PROBLEMA 6.2-7 []Determinare le matrici rappresentative degli operatori canonici nella base degli autostati dell'energia $|n\rangle$ e verificare che coincidono con le matrici infinite introdotte nel Probl. 5.2-5.

PROBLEMA 6.2-8 []Determinare la rappresentazione degli stati $|n\rangle$ in termini di funzione d'onda.

SOLUZIONE *[]Se anziché applicare il metodo algebrico studiamo direttamente l'equazione di Schroedinger dobbiamo ottenere gli autovettori come funzioni di* q. *Ricordiamo la forma adimensionale* (6.7). *Attraverso la sostituzione*

$$\psi = \exp(-\alpha\xi^2)\phi(\xi)$$

l'equazione si trasforma in

$$-[\phi'' - 4\alpha\xi\phi' + (4\alpha^2\xi^2 - 2\alpha)\phi] + \xi^2\phi = 2\varepsilon\phi \ .$$

Per $\alpha = \frac{1}{2}$ *si cancellano i termini quadratici in* ξ *e l'equazione diventa del tipo solubile con il metodo di Laplace:*

$$-\phi'' + 2\xi\phi' = (2\varepsilon - 1)\phi \ .$$

[4] Si impiega anche equivalentemente il termine *distruttore*.

Secondo il metodo generale, si pone

$$\phi(\xi) = \int_{\mathcal{C}} e^{z\xi} F(z) dz$$

e si ottiene, dopo un'integrazione per parti,

$$\int_{\mathcal{C}} e^{z\xi} \left\{ \frac{d}{dz}(2zF) + (z^2 + 2\varepsilon - 1)F \right\} dz - 2ze^{z\xi} F(z) \Big|_{\gamma_1}^{\gamma_2} = 0 \, .$$

Si intende che $\mathcal{C}$ è un cammino nel campo complesso, con estremi γ_1, γ_2. L'equazione è soddisfatta se

$$\frac{d}{dz} \log(2zF) = -\frac{z^2 + 2\varepsilon - 1}{2z}$$

e inoltre il contributo agli estremi di $\mathcal{C}$ si annulla. Dall'equazione si ottiene facilmente

$$F(z) = z^{-\varepsilon - \frac{1}{2}} \exp(-\tfrac{1}{4} z^2) \, ,$$

e si dovrà rispettare il vincolo

$$z^{\frac{1}{2} - \varepsilon} \exp(-\tfrac{1}{4} z^2 + z\xi) \Big|_{\gamma_1}^{\gamma_2} = 0 \, .$$

Si distinguono due casi.
i) $\varepsilon - \frac{1}{2} = n = \mathtt{intero}$. *In questo caso possiamo scegliere un cammino chiuso semplice che contiene l'origine al suo interno e la soluzione si può esplicitare attraverso la formula integrale di Cauchy:*

$$\begin{aligned} \phi_n(\xi) &= \oint \frac{dz}{z^{n+1}} \exp(-\tfrac{1}{4} z^2 + z\xi) \\ &\propto \left(\frac{\partial}{\partial t} \right)^n \exp(-t^2 + 2\xi t) \Big|_{t=0} \\ &= e^{\xi^2} \left(\frac{\partial}{\partial t} \right)^n \exp(-(t - \xi)^2) \Big|_{t=0} \\ &= (-)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-\xi^2} \, . \end{aligned}$$

Le funzioni ϕ_n sono per costruzione dei polinomi, noti come **polinomi di Hermite** *e usualmente indicati con il simbolo $H_n(\xi)$. Dalla formula possiamo normalizzare questi polinomi in modo che*

$$\Phi(\xi, t) = \exp(-t^2 + 2\xi t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} t^n \, . \tag{6.9}$$

La funzione Φ è detta la funzione generatrice *dei polinomi di Hermite e si può convenientemente utilizzare per trattare in modo sintetico tutta la base dei polinomi, ad es. per dimostrare esplicitamente l'ortogonalità delle funzioni*

$$\psi_n(\xi) = \exp(-\tfrac{1}{2}\xi^2) H_n(\xi)$$

(vedi il Probl. 6.2-9). Abbiamo così ottenuto le funzioni d'onda corrispondenti ai vettori $|n\rangle$. *Si potrebbe anche sfruttare in modo semplice l'algebra degli operatori* $a, a^\dagger$ *per raggiungere rapidamente lo stesso scopo (vedi il Probl. 6.2-10 a p. 130).*

ii) *Se* $\varepsilon - \frac{1}{2} \notin \mathbb{Z}$, *allora la funzione* $z^{\varepsilon-\frac{1}{2}}$ *è polidroma e per annullare il contributo al contorno del cammino* $\mathcal{C}$ *siamo costretti a spingere* γ_1 *e* γ_2 *all'infinito dove* $\exp(-z^2/4)$ *si annulla. Se poniamo il taglio della funzione polidroma sulla semiretta positiva il cammino abbraccia il taglio in senso orario da* $\infty - i\delta$ *a* $\infty + i\delta$. *Attraverso una traslazione* $z \to z + 2\xi$, *si trasforma l'integrale nel seguente (*$\mathcal{C}_\xi$ *è il nuovo cammino che circonda il punto di diramazione in* $z = -2\xi$*)*

$$\phi(\xi) = e^{\xi^2} \int_{\mathcal{C}_\xi} \frac{\exp(-z^2/4)}{(z+2\xi)^{\varepsilon+\frac{1}{2}}}\, dz,$$

che si può valutare asintoticamente per $\xi \to \infty$, *e cioè* $\phi \sim \exp(\xi^2)/(2\xi)^{\varepsilon+\frac{1}{2}}$ *il che rende la* ψ *divergente come* $\exp(\frac{1}{2}\xi^2)$ *e quindi non accettabile come autofunzione.*

PROBLEMA 6.2-9 [] Dimostrare la relazione di ortogonalità

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_n(\xi) H_m(\xi)\, e^{-\xi^2} = 0, \text{per } n \neq m\,.$$

SOLUZIONE *[]Si considera l'integrale*

$$G(t,s) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, \Phi(\xi,t)\, \Phi(\xi,s)\,,$$

dove la Φ *è stata determinata nel problema precedente. Sviluppando in serie si ha*

$$\begin{aligned} G(t,s) &= \sum_n \sum_m \frac{1}{n!m!} \int d\xi\, H_n(\xi) H_m(\xi)\, e^{-\xi^2} t^n s^m \\ &= \int d\xi\, \exp\{-t^2 - s^2 + 2\xi(t+s) - \xi^2\} \\ &= e^{2ts} \int d\xi\, \exp\{-(\xi - t - s)^2\} = \sqrt{\pi} e^{2ts}\,. \end{aligned}$$

dove si è fatto uso dell'Eq. (6.9). *A questo punto abbiamo due sviluppi in serie di* $G(t,s)$, *uno fornito dalla serie di Taylor di* e^{2ts}, *l'altro in termini degli integrali* $\int H_n H_m \exp(-\xi^2)$. *Confrontando le singole potenze* $t^n s^m$ *si ottiene*

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, H_n(\xi) H_m(\xi)\, e^{-\xi^2} = \sqrt{\pi}\, 2^n n!\, \delta_{nm}\,.$$

PROBLEMA 6.2-10 [] Costruire le autofunzioni $\psi_n(\xi)$ dell'oscillatore armonico a partire dalla rappresentazione $\langle \xi | n \rangle = \langle \xi |\, a^{\dagger n}\, |0\rangle / \sqrt{n!}$.

SOLUZIONE *[]Le autofunzioni sono ottenibili applicando l'operatore di creazione allo stato fondamentale secondo la* (6.8). *Tuttavia il calcolo diretto di*

$$\left(-\frac{d}{d\xi} + \xi\right)^n \exp(-\tfrac{1}{2}\xi^2)$$

non è immediato. Conviene fare ricorso ad una identità che permette di esprimere un operatore della forma "derivata + funzione(x)" in termini più semplici:

$$\frac{d}{dx} + f(x) = e^{-F(x)} \frac{d}{dx} e^{F(x)}, \; f(x) \equiv \frac{dF}{dx} \; . \tag{6.10}$$

Ciò permette infatti di calcolare semplicemente una potenza qualunque nella forma

$$\left(\frac{d}{dx} + f(x)\right)^n = \exp\{-F(x)\} \left(\frac{d}{dx}\right)^n \exp\{F(x)\}$$

in quanto tutti i fattori contigui e^F *e* e^{-F} *si cancellano a due a due. Troviamo così*

$$\begin{aligned} \psi_n(\xi) &= (2^n n! \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{1}{2}\xi^2} \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2} \\ &= (2^n n! \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} \; e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi) \; . \end{aligned} \tag{6.11}$$

La Fig. 6-3 mostra le prime autofunzioni dell'oscillatore armonico in unità naturali ($\hbar = m = \omega = 1$*). mentre la Fig. 6-4 mostra la densità di probabilità per uno stato con numero quantico elevato. La curva di inviluppo è data semplicemente da*

$$\rho_n(x) = \left(\pi(2n + 1 - x^2)\right)^{-\frac{1}{2}}$$

La spiegazione di questa semplice approssimazione si avrà attraverso la tecnica "WKB" (vedi il §10.2).

PROBLEMA 6.2-11 []Considerare l'Hamiltoniano

$$H = a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + \gamma a_1^\dagger a_2 + \overline{\gamma} a_2^\dagger a_1 \; .$$

Individuare l'insieme di valori di γ per cui H è positivo e determinarne lo spettro.

PROBLEMA 6.2-12 []Calcolare lo spettro della Hamiltoniana

$$H = \hbar \sum_{mn} \Omega_{mn} a_m^\dagger a_n \, ,$$

dove Ω è una matrice hermitiana a spettro positivo e a_n $(n = 1, 2, ..., N)$ sono operatori di annichilazione mutuamente commutanti.

SOLUZIONE *[]Attraverso una trasformazione unitaria* $A_n = S_{nm} a_m$ *si può ricondurre* H *alla somma di* N *oscillatori armonici disaccoppiati. Se* $\omega_1, ..., \omega_N$ *sono gli autovalori positivi di* Ω *si avrà (senza necessità di effettuare alcun calcolo) la seguente espressione per gli autovalori di* H*:*

$$E_{n_1,...,n_N} = \sum_j \hbar n_j \omega_j \; .$$

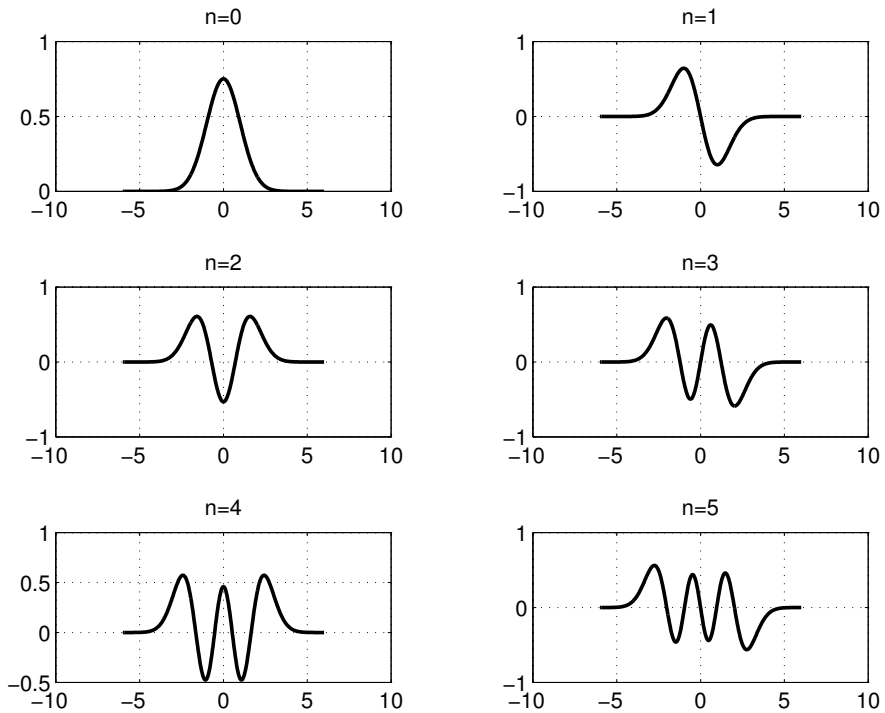


FIGURA 6-3. *Le autofunzioni dell'energia di ordine più basso per l'oscillatore armonico.*

6.2.2. Fattorizzazione dell'Hamiltoniano. Il metodo algebrico che ha permesso di studiare in modo così semplice lo spettro dell'oscillatore armonico è essenzialmente equivalente alla proprietà puramente analitica dell'operatore differenziale $-d^2/dx^2 + x^2$ di ammettere una fattorizzazione in termini di operatori del primo ordine $x \pm d/dx$. Tale fattorizzazione si può incontrare in vari altri casi che permettono una soluzione analitica dell'equazione di Schroedinger. C'è tuttavia un aspetto del problema che non va sottovalutato, pena l'insorgere di imbarazzanti paradossi, come mostrato da Klauder (lezioni di Schladming, 1969). Si consideri l'operatore differenziale

$$D = \phi(x)\,\frac{\partial}{\partial x}\,\phi(x)^{-1} = \frac{\partial}{\partial x} - \phi'/\phi\,,$$

con $\phi \in \mathcal{L}_2$. Lavorando in via del tutto formale, si trova

$$D^\dagger = -\phi(x)^{-1}\,\frac{\partial}{\partial x}\,\phi(x) = -\frac{\partial}{\partial x} - \phi'/\phi\,,$$

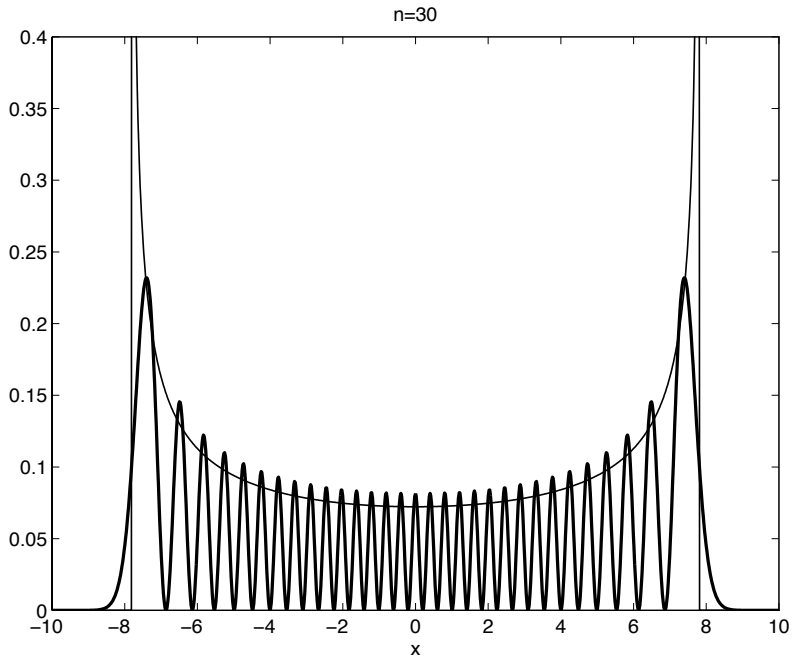


FIGURA 6-4. *La densità* $\rho_n = |\psi_n(x)|^2$ *per uno stato altamente eccitato dell'oscillatore armonico; è riportata anche la distribuzione di probabilità classica* $\rho_{cl} \propto 1/|p(E,x)|$.

e quindi

$$K := D^\dagger D = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \phi''/\phi$$

È evidente che K ammette ϕ come autovettore appartenente all'autovalore zero. Inoltre il fatto che K è fattorizzabile come $D^\dagger D$ in modo analogo all'Hamiltoniano dell'oscillatore armonico può indurci a concludere che ϕ rappresenti proprio lo stato fondamentale (da $\langle\psi| D^\dagger D |\psi\rangle = |D\psi|^2 \geq 0$). Attenzione però. Se ϕ'/ϕ è singolare quanto affermato potrebbe essere falso. Si consideri ad es. $\phi = x\exp\{-x^2/2\}$; si trova facilmente $\phi''/\phi = x^2 - 3$ e lo stato fondamentale non è 0 ma -2! Il punto è che D è definito in un dominio che richiede una condizione al contorno di annullamento in $x = 0$. In tale dominio K è fattorizzato e positivo definito ma non è un operatore autoaggiunto. Tuttavia K ammette un'estensione autoaggiunta; per l'estensione *non vale la fattorizzazione* e cade la conclusione sulla natura positiva dello spettro. La lezione è che manipolazioni formali di operatori singolari sono potenzialmente sorgenti di errori. L'apparire di operatori singolari in un modello fisico può essere il segnale che il problema

è mal posto, oppure che si è operata un'eccessiva schematizzazione (ad es. cariche puntiformi).

Track 2

6.2.3. Stati coerenti. Per l'oscillatore armonico è possibile introdurre una base di vettori nello spazio di Hilbert, detti *stati coerenti*, che gode della notevole proprietà seguente [**Sch77**]: ogni vettore è individuato da un punto nello spazio delle fasi classico e la sua evoluzione secondo l'equazione di Schroedinger è descritta esattamente dalla orbita classica, e cioè:

$$(p, q) \mapsto |p, q\rangle \ , \quad e^{-iHt/\hbar} |p, q\rangle \propto |p(t), q(t)\rangle \ .$$

Si conoscono pochi sistemi che condividono questa proprietà dell'oscillatore armonico, e si tratta di sistemi elementari caratterizzati in termini algebrici (una qualche algebra di Lie prende il ruolo dell'algebra degli operatori canonici). Per una trattazione generale si veda [**KS85, Per86**]. Il modo più semplice per costruire la base degli stati coerenti è la seguente: si consideri uno stato ottenuto dallo stato fondamentale per traslazione (una gaussiana centrata in $x = q$)

$$\psi_q(x) = \mathcal{N} \exp\{-\tfrac{m\omega}{2\hbar}(x - q)^2\} \ ,$$

ovvero in termini più simbolici $|q\rangle = e^{iqp/\hbar} |0\rangle$. L'evoluzione temporale sarà data da

$$\begin{aligned} |q\rangle_t &= e^{-iHt/\hbar} e^{iqp/\hbar} |0\rangle \\ &= e^{-iHt/\hbar} e^{iqp/\hbar} e^{iHt/\hbar} |0\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}\omega t} \exp\{iq\cos(\omega t)p - im\omega q \sin(\omega t) q\} |0\rangle \ . \end{aligned}$$

Se si definisce allora più in generale

$$|q, p\rangle = \exp\{iqp + ipq\} |0\rangle \, , \tag{6.12}$$

si trova che l'evoluzione temporale è data semplicemente dalla legge del moto classica.

Si preferisce spesso utilizzare direttamente gli operatori di creazione e annichilazione e definire gli stati

$$|z\rangle = e^{\bar{z}a^\dagger - za} |0\rangle \ .$$

Applichiamo la formula di Baker-Hausdorff e otteniamo

$$
\begin{aligned}
|z\rangle &= e^{-\frac{1}{2}|z|^2}\, e^{\bar{z}a^\dagger}\, e^{za}\, |0\rangle \\
&= e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \sum_{n=0}^{\infty} (\bar{z}a^\dagger)^n\, |0\rangle\, /n! \\
&= e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{z}^n}{\sqrt{n!}}\, |n\rangle \ .
\end{aligned}
\tag{6.13}
$$

La corrispondenza tra le due definizioni (6.12) e (6.13) è data semplicemente da $z = (p + im\omega q)/\sqrt{2m\omega\hbar}$.

PROBLEMA 6.2-13 []Dimostrare che l'insieme degli stati coerenti forma una base nello spazio di Hilbert nel senso che ogni vettore può essere espresso come combinazione lineare di stati coerenti.

SOLUZIONE *[]Dalla definizione, per integrazione su tutto il piano complesso, si trova facilmente la relazione*[5]

$$\tfrac{1}{2\pi i} \int \overline{dz}\, dz\ |z\rangle\langle z| = \mathbb{1}\,,$$

che mostra come ogni vettore sia esprimibile come sovrapposizione di stati coerenti

$$|\psi\rangle = \tfrac{1}{2\pi i} \int \overline{dz}\, dz\ |z\rangle\, \langle z|\psi\rangle \ .$$

Si tratta tuttavia di una base non-ortogonale. Infatti si verifica facilmente che $|\langle z|\zeta\rangle| = \exp\{-\frac{1}{2}|z-\zeta|^2\}$.

La rappresentazione

$$|\psi\rangle \mapsto \psi(z) \equiv \langle z|\psi\rangle$$

è nota come **rappresentazione di Bargmann**. Si noti che la funzione $\psi(z)$ è della forma

$$\psi(z) = e^{-\frac{1}{2}|z|^2} f(z)$$

con $f(z)$ analitica regolare in ogni regione limitata del piano complesso (una funzione *intera*). Infatti il resto N-esimo della serie di Taylor

$$f(z) = \sum_{0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}}\, \langle n|\psi\rangle$$

è maggiorato secondo la disuguaglianza di Cauchy da

$$\left|\sum_{N}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}}\, \langle n|\psi\rangle\right| \le \left[\sum_{N}^{\infty} |\langle n|\psi\rangle|^2\right]^{\frac{1}{2}} \left[\sum_{N}^{\infty} |z|^{2n}/n!\right]^{\frac{1}{2}} \ .$$

Ora si ha che il primo fattore è minore della norma di $|\psi\rangle$ mentre il secondo rappresenta il resto della serie esponenziale, che pertanto si può rendere

[5] L'elemento d'area $\overline{dz}\, dz$ equivale a $2i\, dx\, dy$, nel senso del *calcolo differenziale esterno* di Cartan, essendo $z = x + iy$.

piccolo a piacere scegliendo N sufficientemente grande. Le funzioni intere che costituiscono lo "spazio di Bargmann" sono caratterizzate da una crescita all'infinito di tipo esponenziale:

$$|f(z)| = e^{\frac{1}{2}|z|^2} \, |\langle z|\psi\rangle| \leq e^{\frac{1}{2}|z|^2} \, \|\psi\| \, . \tag{6.14}$$

Una seconda caratterizzazione, del tutto equivalente, degli stati coerenti è la seguente:

Teorema 6.2.1 []I vettori $|z\rangle$ sono autovettori dell'operatore di annichilazione

$$a\,|z\rangle = \bar{z}\,|z\rangle \ .$$

La dimostrazione è immediata a partire dalla definizione (6.13).

PROBLEMA 6.2-14 []Dimostrare che gli operatori di creazione e annichilazione sono rappresentati nel modo seguente nella base degli stati coerenti

$$a\,f(z) = \frac{df(z)}{dz}$$
$$a^\dagger\,f(z) = zf(z) \ .$$

Track 2

6.2.4. Ordinamento normale alla Wick. In numerose applicazioni risulta utile esprimere un operatore in termini di prodotti ordinati di a e $a^\dagger$, in quanto ciò facilita il calcolo di elementi di matrice. Un monomio del tipo $(a^\dagger)^n\,a^m$ è detto *ordinato normalmente* o **Wick-ordinato** . Se in un prodotto $\mathcal{O}$ di operatori $a, a^\dagger$ si portano tutti i fattori a alla destra di $a^\dagger$ *senza tenere conto dei commutatori* si dice che si considera l'ordinamento di Wick dell'operatore, indicato con il simbolo $:\mathcal{O}:$. Per convenzione si pone per l'operatore identità $:\mathbb{1}:= 0$. (Ad es. $:p^2 + q^2: = 2a^\dagger a$). Per semplicità di notazione nel seguito adottiamo unità in cui $\hbar = m = \omega = 1$.

PROBLEMA 6.2-15 []Dimostrare che se

$$\langle z|\,\mathcal{O}(a^\dagger, a)\,|z\rangle = \sum_{nm} c_{nm} z^n \bar{z}^m$$

si ha

$$\mathcal{O} = \sum_{nm} c_{nm} a^{\dagger\,n}\,a^m$$

che rappresenta lo sviluppo di $\mathcal{O}$ in monomi Wick-ordinati.

PROBLEMA 6.2-16 []Dimostrare che vale l'identità

$$q^n = (2i)^{-n} :H_n((a^\dagger - a)/\sqrt{2}): \equiv (2i)^{-n} :H_n(iq): \, .$$

SOLUZIONE *[]Calcoliamo la funzione generatrice*

$$\begin{aligned}\langle z|\exp\{2i\alpha q\}|z\rangle &= \langle z|\exp\{\sqrt{2}\alpha(a^\dagger - a)\}|z\rangle \\ \textit{(per la Baker-Hausdorff)} &= e^{-\alpha^2}\langle z|e^{\sqrt{2}\alpha a^\dagger}e^{-\sqrt{2}\alpha a}|z\rangle \\ &= \exp\{-\alpha^2 + 2\alpha(z-\bar{z})/\sqrt{2}\}\,.\end{aligned}$$

Si sviluppa ora in serie di potenze di α e si applica il risultato precedente. Ad esempio si ha

$$\begin{aligned}q^2 &= :q^2: + \tfrac{1}{2}\mathbb{1} \\ q^3 &= :q^3: + \tfrac{3}{2}:q: \\ q^4 &= :q^4: + 3:q^2: + \tfrac{3}{4}\mathbb{1}\,.\end{aligned}$$

PROBLEMA 6.2-17 []Calcolare l'elemento di matrice $\langle n|q^K|n\rangle$ utilizzando lo sviluppo in monomi Wick-ordinati.

PROBLEMA 6.2-18 []Applicare l'equazione (5.45) al caso dell'oscillatore armonico e dedurne la seguente relazione di ricorrenza per gli elementi di matrice diagonali di q^{2k}:

$$(k+1)\,J_{k+1} = (2k+1)(n+\tfrac{1}{2})\,J_k + k(k^2-\tfrac{1}{4})\,J_{k-1}$$

essendo J_k gli elementi di matrice in unità naturali per l'oscillatore

$$J_k \equiv \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^k \langle n|q^{2k}|n\rangle$$

e dedurne i valori seguenti

$$\begin{aligned}J_1 &= n + \tfrac{1}{2} \\ J_2 &= \tfrac{3}{4}(1+2n+2n^2) \\ J_3 &= \tfrac{5}{8}(3+8n+6n^2+4n^3) \\ J_4 &= \tfrac{35}{16}(3+8n+10n^2+4n^3+2n^4) \\ &\ldots\end{aligned} \tag{6.15}$$

PROBLEMA 6.2-19 [] Determinare la funzione di Green dell'oscillatore armonico

$$G(x,x',t) = \sum_n \frac{1}{\sqrt{\pi}2^n\,n!}\,H_n(x)\,H_n(x')\,\exp\{-\tfrac{1}{2}(x^2+x'^2)\}\;e^{-i(n+\frac{1}{2})t}\,.$$

SOLUZIONE *[]Il calcolo della serie si può ricondurre a proprietà dei polinomi di Hermite (si veda* [**Pau62**]*). Tuttavia è più semplice procedere per via formale. La funzione di Green è data dalla evoluzione temporale di una funzione localizzata all'istante iniziale:*

$$(q-x')\,\delta(x-x') = 0\,.$$

Si avrà perciò

$$e^{-iHt}\,(q-x')\,\delta(x-x') = e^{-iHt}\,(q-x')e^{iHt}\,e^{-iHt}\,\delta(x-x') = 0\,.$$

Si trova poi

$$e^{-iHt}(q - x')\,e^{iHt} = q\cos t - x' - p\sin t$$

e quindi la funzione $G(x, x', t)$ *è soluzione dell'equazione*

$$\left(x\cos t - x' + i\sin t\frac{\partial}{\partial x}\right) G(x, x', t) = 0\,,$$

ossia

$$\log G(x, x', t) = i\frac{x^2\cos t - 2xx'}{2\sin t} + \phi(x', t)\,.$$

La funzione ϕ *è fissata dal fatto che* G *è simmetrica in* x, x' *e quindi* $\phi = ix'^2\cot t + \rho(t)$. *Per determinare* $\rho(t)$ *è infine sufficiente imporre che* G *sia soluzione dell'equazione di Schroedinger e limitarsi a* $x = x' = 0$, *dove risulta più agevole il calcolo. Si trova così:*

$$G(x, x', t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i\sin t}}\exp\left\{i\frac{(x^2 + x'^2)\cos t - 2xx'}{2\sin t}\right\}\,. \tag{6.16}$$

Osservare che in corrispondenza ai valori $t = \frac{1}{2}\pi \pmod{\pi}$ *il nucleo integrale coincide con quello di Fourier, il che si comprende facilmente in base al fatto che l'evoluzione dell'oscillatore a un quarto di periodo corrisponde ad una rotazione in senso orario nel piano* (p, q) *che realizza la trasformazione canonica* $q' = p$, $p' = -q$ *e questo fatto si trasporta inalterato in meccanica quantistica.*

6.3. Spettro continuo

Track 1

6.3.1. Barriere di potenziale ed effetto tunnel. Consideriamo ora l'equazione di Schroedinger per quanto riguarda le proprietà dinamiche dello spettro continuo. Il problema che affronteremo è quello del moto con energia positiva di una particella in presenza di un potenziale $V(x)$ localizzato nello spazio (nullo al di fuori di un intervallo limitato o più brevemente *a supporto compatto*):

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } x < -a \text{ (regione I)} \\ \frac{\hbar^2}{2m}U(x) & \text{per } |x| < a \text{ (regione II)} \\ 0 & \text{per } x > a \text{ (regione III)} \end{cases}$$

La meccanica classica prevede due classi di movimenti possibili: se l'energia è maggiore del massimo valore del potenziale, la particella, inizialmente in moto con velocitaà positiva nella regione I, prosegue nella sua corsa e si troverà nella regione III dopo un certo tempo di volo. In caso contrario la particella rimbalza sulla barriera di potenziale e ritorna nella regione I. Nel caso limite in cui $E \equiv \max(V)$ la particella raggiunge il massimo del potenziale in un tempo infinito: si tratta di un'orbita instabile, in

quanto una variazione arbitrariamente piccola della velocità iniziale porta a grandi differenze nella posizione finale. La descrizione quantistica, come vedremo ora, è radicalmente differente.

Pensiamo ad esempio ad un pacchetto d'onda che si propaga liberamente nella regione I con momento medio positivo. Il pacchetto entra in interazione con il potenziale e ogni sua componente di Fourier ne viene sfasata in modo differente, il che porta alla parziale riflessione del pacchetto. Detto $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, la soluzione è data da porzioni di onda piana nelle regioni I e III, raccordate con continuità alla soluzione $\psi(x) = u_{II}(x)$ nella regione II :

$$\psi_k(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B\, e^{-ikx} & \text{(regione I)} \\ u_{II}(x) & \text{(regione II)} \\ F\, e^{ikx} + G\, e^{-ikx} & \text{(regione III)} \end{cases} \tag{6.17}$$

Le condizioni di raccordo (continuità della funzione e della sua derivata prima in $x = -a$ e in $x = a$) permettono di esprimere univocamente le costanti (F, G) in termini di (A, B) attraverso una relazione lineare che indicheremo con

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = W \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

e chiameremo W *la matrice di trasferimento*. La soluzione nella regione II potrà essere determinata analiticamente o numericamente, ma al momento la cosa non è rilevante. Chiameremo $\psi_k^{in}(x)$ la soluzione corrispondente a $A = 1, G = 0$ e con $\psi_{-k}^{in}(x)$ la soluzione corrispondente a $A = 0, G = 1$:

$$\psi_k^{in} = \begin{cases} e^{ikx} + \rho(k)\, e^{-ikx}, & x < -a \\ \tau(k)\, e^{ikx}, & x > a \end{cases}$$

$$\psi_{-k}^{in} = \begin{cases} \tau(-k)\, e^{-ikx}, & x < -a \\ e^{-ikx} + \rho(-k)\, e^{ikx}, & x > a \end{cases}$$

Per sovrapposizione lineare di soluzioni di questo tipo potremo costruire il più generale pacchetto d'onde.

$$\psi(x, t) = \int \phi(k)\, \psi_k^{in}(x)\, e^{-i\hbar k^2 t/2m}\, dk\,.$$

Vogliamo mostrare che se limitiamo l'integrale a k positivi *la soluzione rappresenta un pacchetto d'onde che per* t *molto grande negativo si trova nella regione I in moto verso destra, mentre per* t *grande positivo il pacchetto d'onde si decompone in due componenti principali, una trasmessa a destra della barriera e una riflessa che ritorna verso la regione I*. Per questo facciamo ricorso al metodo della fase stazionaria. Dal momento che il pacchetto deve essere in movimento dobbiamo valutare l'integrale per $x \propto t$ per individuare la posizione del massimo del pacchetto. Sia

dunque $x = vt$; sostituendo nell'integrale e prendendo il limite per $t \to -\infty$ siamo condotti a ricercare i punti in cui la fase dell'onda ha derivata nulla rispetto a k. Si trova così:

A	B	C	D
$x = vt < 0$	$\exp\left\{-i\frac{\hbar k^2 t}{2m} + ikvt\right\}$	$k = +mv/\hbar$	$t < 0,\ v > 0$
$x = vt < 0$	$\rho(k)\exp\left\{-i\frac{\hbar k^2 t}{2m} - ikvt\right\}$	$k = -mv/\hbar$	$t > 0,\ v < 0$
$x = vt > 0$	$\tau(k)\exp\left\{-i\frac{\hbar k^2 t}{2m} + ikvt\right\}$	$k = +mv/\hbar$	$t > 0,\ v > 0$

dove nella colonna C è riportato il valore di k per cui la fase risulta stazionaria, e nella D i valori per cui il termine in B interferisce costruttivamente. Si trova cioè che i termini proporzionali a τ e ρ non rispettano la condizione di fase stazionaria per $t \ll 0$, mentre costituiscono il termine dominante all'integrale per $t \gg 0$. Si trova in definitiva

$$\psi(x,t) \sim \sqrt{\frac{2\pi i m}{\hbar t}}\exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) \times \begin{cases} \phi(\frac{mx}{t\hbar}) & \text{per } t \to -\infty \\ \phi(-\frac{mx}{t\hbar})\,\rho(-\frac{mx}{t\hbar}) + \phi(\frac{mx}{t\hbar})\,\tau(\frac{mx}{t\hbar}) & \text{per } t \to +\infty \end{cases}$$

Risulta chiaro ora il significato dei coefficienti ρ e τ. Per un flusso di particelle di momento k che incidono sulla barriera una percentuale pari a $R = |\rho(k)|^2$ viene riflessa e una percentuale $T = |\tau(k)|^2$ supera la barriera. È naturale perciò definire $\tau(k)$ **ampiezza di trasmissione** e $\rho(k)$ **ampiezza di riflessione**.

PROBLEMA 6.3-20 []Dimostrare l'identità $T + R = 1$.

SOLUZIONE *[]Si calcoli la densità di corrente per la soluzione ψ_k^{in} e si tenga conto della equazione di continuità.*

Osservazione *[]Il pacchetto d'onde riflesso e quello trasmesso si muovono in genere con velocità differenti! Infatti la posizione del massimo dei due pacchetti è determinata dai prodotti $\phi\rho$ e $\phi\tau$; se ad esempio ϕ è concentrata su un valore di $k = k_0$ in cui $|\rho(k)|$ è crescente il massimo di $|\phi\rho|^2$ si troverà ad un valore $k_0^r > k_0$, e quello di $|\phi\tau|^2$ ad un valore $k_0^t < k_0$. Ciò non è in contraddizione con la conservazione dell'energia: si ponga attenzione al fatto che l'energia cinetica media del pacchetto* non è direttamente legata alla velocità di propagazione del pacchetto d'onde. *Ad esempio un pacchetto d'onde del tipo* $\psi \propto \exp(-\alpha x^2)$ *(reale) evolve nel tempo mantendendo il massimo in $x = 0$, ma nondimeno la sua energia cinetica media non è affatto nulla.*

Il fatto cruciale che caratterizza la meccanica ondulatoria consiste in questo: *il coefficiente di trasmissione è in genere diverso da zero anche per valori dell'energia minori del massimo dell'energia potenziale, una situazione in cui secondo la meccanica classica la particella sarebbe sempre riflessa*. Questo fenomeno tipicamente quantistico viene denominato **effetto tunnel** ed è ampiamente sfruttato nei moderni dispositivi microelettronici. Si noti peraltro che si ha anche il fenomeno reciproco, secondo cui il coefficiente di riflessione non si annulla necessariamente per energia superiore al massimo della barriera di potenziale.

6.3.2. Formulazione integrale dell'equazione d'onda. Mostreremo ora come si può impostare un calcolo approssimato in forma di serie di potenze; questo metodo sarà utilizzato, con solo lievi modifiche, nella teoria quantistica dei processi d'urto.

Scriviamo l'equazione di Schroedinger nella forma

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)\psi(x) = \chi(x)$$

$$\chi(x) = \frac{2mV(x)}{\hbar^2}\psi(x)$$

e risolviamo la prima equazione in modo simile all'equazione di Poisson: trattandosi di un'equazione lineare inomogenea, si tratta di determinare una soluzione particolare e combinarla linearmente con la soluzione generale dell'equazione omogenea. Tenendo conto dell'identità (vedi l'App. B.5)

$$\frac{d^2|x|}{dx^2} = \frac{d\epsilon(x)}{dx} = 2\delta(x)$$

si verifica che la soluzione particolare ha la forma

$$\psi(x) = (2ik)^{-1}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x-x'|}\,\phi(x')\,dx'$$

e quindi l'equazione di Schroedinger per gli stati ψ_k^{in} è equivalente alla seguente

$$\psi(x) = e^{ikx} + (2ik)^{-1}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{2m}{\hbar^2}V(x')\,e^{ik|x-x'|}\,\psi(x')\,dx'\,. \tag{6.18}$$

Se il potenziale ha supporto compatto (diciamo nell'intervallo $(-a, a)$) si trova allora

$$\psi_k^{in}(x) \sim \begin{cases} e^{ikx} + \left(m\int_{-a}^{a} e^{ikx}V(x')\,\psi_k^{in}(x')\,dx'/ik\hbar^2\right)e^{-ikx} & x < -a \\ e^{ikx}\left(1 + m\int_{-a}^{a} e^{-ikx}V(x')\,\psi_k^{in}(x')\,dx'/ik\hbar^2\right) & x > a. \end{cases}$$

da cui si identificano le due ampiezze τ e ρ in termini impliciti attraverso la soluzione. L'equazione integrale (6.18) si può risolvere come ogni

equazione della forma

$$\psi = \psi_0 + \mathbf{K}\psi$$

con il metodo della serie di Neumann: formalmente infatti si può procedere come segue:

$$(\mathbb{1} - \mathbf{K})\psi = \psi_0 \tag{6.19}$$

$$\psi = (\mathbb{1} + \mathbf{K} + \mathbf{K}^2 + \ldots)\,\psi_0\,, \tag{6.20}$$

che converge alla soluzione se $\|\mathbf{K}\| < 1$. Ciò ci fornisce una formula approssimata per l'ampiezza di trasmissione:

$$\begin{aligned}\tau = 1 - i\frac{m}{k\hbar^2}\int_{-a}^{a} V(x)\,dx \\ -\left(\frac{m}{k\hbar^2}\right)^2 \int_{-a}^{a}\int_{-a}^{a} V(x)V(y)\,dx\,dy\,\exp\{ik(y + |x-y| - x)\} + \ldots\end{aligned}$$

La serie così ottenuta è nota come **serie di Born**. Troncata al primo termine essa costituisce l'*approssimazione di Born*. Per un calcolo esplicito risulta conveniente riformulare la serie direttamente nello spazio dei momenti; ciò porta ad una formulazione che si estende senza modifiche al caso tridimensionale. Partendo dall'equazione

$$(p_0^2 - \mathfrak{p}^2)\,|\psi\rangle = 2mV(\mathfrak{q})\,|\psi\rangle\,, \quad p_0 = \sqrt{2mE} \equiv \hbar k\,,$$

e proiettando sulla base delle onde piane, otteniamo

$$\begin{aligned}\langle p|\,(p_0^2 - \mathfrak{p}^2)\,|\psi\rangle &= 2m\,\langle p|\,V(\mathfrak{q})\,|\psi\rangle \\ (p_0^2 - p^2)\,\langle p|\psi\rangle &= 2m\int dp'\,\langle p|\,V(\mathfrak{q})\,|p'\rangle\,\langle p'|\psi\rangle\ .\end{aligned}$$

Si ha poi

$$\mathcal{V}(p - p') \equiv \langle p|\,V(\mathfrak{q})\,|p'\rangle = \int \frac{dx}{2\pi\hbar} e^{ix(p-p')} V(\mathfrak{q})\,,$$

il che ci dà infine

$$(p_0^2 - p^2)\,\psi(p) = 2m\int \mathcal{V}(p - p')\psi(p')\,dp'\ .$$

Per ottenere l'equazione analoga alla (6.18) si divide per $(p_0^2 - p^2)$ e si tiene conto dell'identità $x\,\delta(x) \equiv 0$, che permette di aggiungere un contributo proporzionale a $\delta(p - p_0)$, che rappresenta la particella incidente. Si noti che la divisione per $(p_0^2 - p^2)$ presenta un'ambiguità, in quanto p_0 appartiene allo spettro continuo di $\mathfrak{p}$. Dalla teoria spettrale si sa che il risolvente presenta un taglio nel piano complesso in corrispondenza dello spettro continuo. Se scegliamo la determinazione in cui p_0 viene ottenuto

come limite sull'asse reale per parte immaginaria positiva otteniamo la definizione corretta che corrisponde agli stati ψ^{in} dell'equazione (6.18):

$$\psi_k^{\text{in}}(p) = \sqrt{2\pi\hbar}\,\delta(p-p_0) + \frac{2m}{(p_0+i\varepsilon)^2-p^2}\int \mathcal{V}(p-p')\,\psi_k^{\text{in}}(p')\,. \tag{6.21}$$

Il nucleo integrale $((p_0+i\varepsilon)^2-p^2)^{-1}$ corrisponde a $(2ip_0)^{-1}\exp(ip_0|x-y|)$ nella rappresentazione delle coordinate[6], ed è noto in generale come **propagatore**.

PROBLEMA 6.3-21 []Dimostrare che l'equazione (6.21) è equivalente alla (6.18) e ricavare l'espressione dell'ampiezza di trasmissione in termini di $\psi_k^{\text{in}}(p)$.

SOLUZIONE *[]Integriamo ambo i membri dell'equazione in modo da ottenere*

$$\psi_k^{\text{in}}(x) = e^{ip_0x/\hbar} + \int dp\, e^{ipx/\hbar}\frac{2m}{(p_0+i\varepsilon)^2-p^2}\int dp'\,\mathcal{V}(p-p')\,\psi_k^{\text{in}}(p')\,.$$

L'integrazione in p *si esegue agevolmente con il teorema dei residui; per* $x>0$ *il cammino è costituito dall'intervallo reale* $(-L,L)$ *chiuso con una semicirconferenza di raggio* L *nel semipiano superiore, mentre per* $x<0$ *si deve chiudere il cammino nel semipiano inferiore. Il risultato è perciò*

$$\psi_k^{\text{in}}(x) = e^{ip_0x/\hbar} + \begin{cases}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar}}\frac{m}{ip_0}e^{ip_0x/\hbar}\int dp'\,\mathcal{V}(p_0-p')\,\psi_k^{\text{in}}(p') & x>0\\ \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar}}\frac{m}{ip_0}e^{-ip_0x/\hbar}\int dp'\,\mathcal{V}(-p_0-p')\,\psi_k^{\text{in}}(p') & x<0\end{cases}$$

da cui, di passaggio, otteniamo una formula per l'ampiezza di trasmissione

$$\tau(p_0) = 1 + \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar}}\frac{m}{ip_0}\int dp'\,\mathcal{V}(p_0-p')\,\psi_k^{\text{in}}(p').$$

Sostituendo poi la definizione di $\mathcal{V}(p)$ *si riottiene la* (6.18).

PROBLEMA 6.3-22 []Calcolare l'ampiezza di trasmissione nel caso di un potenziale a corto raggio d'azione ($a\to 0$).

SOLUZIONE *[]Nel limite di raggio d'azione zero l'integrale nell'equazione* (6.18) *si può approssimare con il teorema della media:*

$$\psi(x) \sim e^{ikx} + \frac{m}{ik\hbar^2}\,2a\overline{V}\,\psi(0)\,e^{ik|x|}\,.$$

Introducendo la quantità $\sigma = 2ma\overline{V}/\hbar^2$ *e ponendo* $x=0$ *si ottiene il valore di* $\psi(0)$ *e infine*

$$\psi(x) \sim e^{ikx} - \frac{i\sigma}{k+i\sigma}e^{ik|x|} \tag{6.22}$$

da cui si trova

$$\tau = \frac{k}{k+i\sigma} = \frac{ka}{ka+i\,2m\overline{V}a^2/\hbar^2}\,.$$

[6] Si usa lo stesso termine di *propagatore/funzione di Green* anche per il nucleo integrale dell'operatore di evoluzione, vedi il §5.3.

PROBLEMA 6.3-23 [] Calcolare l'ampiezza di trasmissione τ per un potenziale costituito da due barriere di potenziale poste a distanza L, ognuna a corto raggio d'azione.

SOLUZIONE *[]L'equazione integrale ci dà in questo caso*

$$\psi(x) = e^{ikx} - i\sigma_1\psi(0)\, e^{ik|x|} - i\sigma_2\psi(L)\, e^{ik|x-L|}\,,$$

dove le quantità σ_i *sono definite per ciascuna barriera come nel problema precedente. L'equazione, una volta valutata a* $x = 0$ *e* $x = L$*, si riduce ad un sistema lineare nelle due incognite* $\psi(0)$ *e* $\psi(L)$*. L'ampiezza cercata risulta infine*

$$\begin{aligned}\tau(k) &= 1 - i\sigma_1\psi(0) - i\sigma_2\psi(L)\, e^{-ikL} \\ &= \left((1+i\sigma_1)(1+i\sigma_2) + \sigma_1\sigma_2\, e^{2ikL}\right)^{-1}\,.\end{aligned} \tag{6.23}$$

PROBLEMA 6.3-24 []Dimostrare che una doppia barriera simmetrica può risultare "trasparente" ad una data energia a patto di calibrare accuratamente la distanza L. (Si valuti l'ampiezza di riflessione nel problema precedente con $\sigma_1 = \sigma_2$).

PROBLEMA 6.3-25 []Risolvere i problemi precedenti direttamente dall'equazione di Schroedinger in forma differenziale, utilizzando il potenziale singolare $V(x) = \lambda\delta(x)$ e tenendo conto che in tal caso la condizione di raccordo in $x = 0$ è data da

$$\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0)\,, \tag{6.24}$$

come si verifica facilmente integrando membro a membro l'equazione. La costante λ è legata alla σ dei problemi precedenti da $\lambda = \hbar^2\sigma/m$.

PROBLEMA 6.3-26 []Per una barriera di potenziale $V(x)$ sono note le ampiezze di riflessione e di trasmissione $(\rho(k), \tau(k))$. Discutere l'effetto tunnel per una barriera costituita da due barriere $V(x)$ poste a distanza L.

SOLUZIONE *[]Si tratta della generalizzazione dei problemi precedenti. Dalla conoscenza della soluzione*

$$\psi_k^{in} = \begin{cases} e^{ikx} + \rho e^{-ikx}, & x \to -\infty \\ \tau e^{ikx}, & x \to +\infty \end{cases}$$

si può costruire una base di soluzioni come segue

$$\psi = \alpha\psi_k^{in} + \beta\overline{\psi_k^{in}}\,.$$

(Si verifica che in effetti ψ_k^{in} *e* $\overline{\psi^{in}}_k$ *sono linearmente indipendenti per* $\tau \neq 0$*, il che è la condizione generica per potenziali non-singolari). Passando alla base delle onde piane si può allora costruire la soluzione generale nella forma*

$$\psi_0 = \begin{cases} A\, e^{ikx} + B\, e^{-ikx}, & x \to -\infty \\ \dfrac{A - B\overline{\rho}}{\overline{\tau}} e^{ikx} + \dfrac{B - A\rho}{\tau} e^{-ikx}, & x \to +\infty \end{cases}\,.$$

Esprimeremo più convenientemente questa relazione introducendo la matrice di trasferimento $\mathbf{W}$ *che in questo caso è data da*

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} 1/\overline{\tau} & -\overline{\rho}/\overline{\tau} \\ -\rho/\tau & 1/\tau \end{pmatrix}$$

che ci permette di esprimere la funzione d'onda alla destra della barriera $Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}$ *in termini della funzione alla sinistra semplicemente attraverso la relazione* $\left(\begin{smallmatrix} F \\ G \end{smallmatrix}\right) = \mathbf{W}\left(\begin{smallmatrix} A \\ B \end{smallmatrix}\right)$. *Per la barriera posta in* $x = L$ *si avrà la stessa relazione in termini di onde piane sfasate* $F\,e^{ik(x-L)} + G\,e^{-ik(x-L)}$. *Posta*

$$\mathbf{V}_L = \begin{pmatrix} e^{ikL} & 0 \\ 0 & e^{-ikL} \end{pmatrix}$$

la soluzione del caso generale di un numero qualunque di barriere di potenziale dislocate in $x = 0, L, 2L, \ldots$ *è rappresentabile nella forma*[7]*:*

$$\begin{pmatrix} \tau^{(n)} \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{W}\,\mathbf{V}_L\,\mathbf{W}\,\mathbf{V}_L \ldots \mathbf{W}\,\mathbf{V}_L\,\mathbf{W}\begin{pmatrix} 1 \\ \rho^{(n)} \end{pmatrix} \tag{6.25}$$

Per il caso $n = 2$ *troviamo facilmente*

$$\tau^{(2)} = \frac{\tau^2}{1 + \tau^2|\rho/\tau|^2 e^{2ikL}}$$
$$\rho^{(2)} = \rho\frac{\overline{\tau} + \tau\,e^{2ikL}}{\overline{\tau} + \tau|\rho|^2\,e^{2ikL}}\ .$$

Notiamo che calibrando L *in modo che* $\exp(2ikL) = -\overline{\tau}/\tau$ *si ottiene* $\rho^{(2)} = 0$. *La matrice* $\mathbf{W}$ *è del tipo particolare*

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \xi & \eta \\ \overline{\eta} & \overline{\xi} \end{pmatrix},\ \det \mathbf{W} = 1\ .$$

Matrici di questa forma costituiscono un **gruppo** *denominato* $SU(1,1)$. *Anche* $\mathbf{V}_L$ *appartiene al gruppo, il che conferma che l'equazione* (6.25) *fornisce una risposta consistente: la combinazione di più barriere di potenziale si ottiene moltiplicando le rispettive matrici di trasferimento intercalate con le matrici di sfasamento dipendenti dalla distanza. Un'altra matrice caratteristica per una barriera di potenziale è quella che esprime i coefficienti delle onde uscenti* (F, B) *in termini delle onde entranti* (A, G). *Si trova in generale*

$$\begin{pmatrix} F \\ B \end{pmatrix} = \mathbf{S}\begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix},\ \mathbf{S} = \begin{pmatrix} W_{22}^{-1} & W_{12}\,W_{22}^{-1} \\ -W_{21}\,W_{22}^{-1} & W_{22}^{-1} \end{pmatrix} \tag{6.26}$$

Si verifica immediatamente che gli elementi di matrice di $\mathbf{S}$ *sono direttamente legati alle ampiezze di trasmissione e riflessione (*$S_{11} = \tau(k)$, $S_{21} = \rho(k)$*), e inoltre la matrice* $\mathbf{S}$ *risulta* **unitaria**. *Queste proprietà della matrice* $\mathbf{S}$ *si generalizzano alla* teoria dell'urto.

[7] Il formalismo è ovviamente generalizzabile a barriere disposte a distanze arbitrarie e anche differenti tra loro.

Track 2

6.3.3. Proprietà di analiticità. Consideriamo l'esempio della barriera a corto raggio d'azione. Le ampiezze (ρ, τ) presentano una caratteristica peculiare: entrambe sono estendibili a *funzioni analitiche del parametro complesso* k e presentano una singolarità (un polo semplice) in corrispondenza al valore $k = ik_0 = -i\,2m\overline{V}a/\hbar^2$. Se consideriamo la soluzione (6.22) per k in prossimità di ik_0 troviamo:

$$\psi(x) \sim e^{-k_0 x} + \frac{ikk_0}{k - ik_0} e^{ik|x|} \,.$$

Al limite per $k \to ik_0$ il primo termine è trascurabile e la funzione diventa proporzionale a $\psi \sim \exp\{-k_0|x|\}$, che risulta quindi *una soluzione a quadrato sommabile, dunque uno stato legato, se* $k_0 > 0$; l'energia è data da $E = \hbar^2 k^2/2m = -\hbar^2 k_0^2/2m$, il che si può verificare con un calcolo diretto (la condizione $k_0 > 0$ equivale a $\overline{V} < 0$, cioè $V(x)$ deve essere attrattivo). L'esempio suggerisce perciò che esista una precisa relazione tra gli stati dello spettro continuo e quelli legati, e porta alla congettura che *le singolarità polari degli elementi della "matrice S" nel semipiano superiore* $\mathfrak{Im}\{k\} > 0$ *individuino gli stati legati.* Per una trattazione generale di questo argomento si vedano [**AR65, New66**].

PROBLEMA 6.3-27 [] Considerare la doppia barriera simmetrica del problema 6.3-23 a p. 144. Studiare le singolarità nel piano complesso k delle ampiezze (ρ, τ).

SOLUZIONE *[]Dalla Eq.* (6.23)*, inserendo la definizione di* k_0*, troviamo*

$$\tau = \frac{k^2}{(k - ik_0)^2 + k_0^2 \exp\{2ikL\}}$$

le cui singolarità sono da cercare nelle radici del denominatore (la radice $\kappa = 0$ *è cancellata dall'azzerarsi del numeratore). Ponendo* $k = i\kappa$*, troviamo le due equazioni, che abbiamo posto in termini di variabili adimensionali:*

$$\kappa L = k_0 L\,(1 \pm e^{-\kappa L}) \,.$$

Si vede facilmente che per $k_0 L > 1$ *esistono due radici, mentre per* $k_0 L \le 1$ *solo l'equazione con il segno positivo ammette una soluzione. Inoltre per* $k_0 L$ *molto grande le radici sono bene approssimate da*

$$\kappa \sim k_0 (1 \pm e^{-k_0 L}) \,.$$

Questa situazione è fisicamente molto intuitiva: grandi valori di L *corrispondono a due buche di potenziale attrattivo separate da una grande distanza. In questo caso ci aspettiamo che la particella venga legata in una delle due buche con un'energia di legame uguale a quella che avrebbe in assenza dell'altra buca. Tuttavia la particella, per effetto tunnel, non può essere confinata stabilmente in una delle due buche. Uno stato stazionario può essere ottenuto distribuendo con eguale probabilità la particella nelle due buche; si ottengono in generale due stati combinando in modo simmetrico e in modo antisimmetrico le due funzioni d'onda*

localizzate e il termine $\exp(-k_0 L)$ *che rappresenta la differenza di energia tra i due livelli quasi degeneri è palesemente legato all'ampiezza di trasmissione della barriera che separa le due buche, in base alla formula approssimata che troveremo nel cap. 10.2.*

PROBLEMA 6.3-28 []Calcolare il coefficiente di trasmissione per una barriera di potenziale del tipo "barriera rettangolare"

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| > a \\ V_0 > 0 & |x| \le a \end{cases}$$

SOLUZIONE *[]Consideriamo innanzitutto la soluzione per* $E < V_0$*: la funzione* ψ_k^{in} *ha la forma*

$$\psi_k^{in}(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho e^{-ikx} & x < -a \\ Ae^{\chi x} + Be^{-\chi x} & |x| < a \\ \tau e^{ikx} & x > a \end{cases}$$

dove $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ *e* $\chi = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$*. Le condizioni di raccordo in* $x = \pm a$ *ci danno*

$$\begin{cases} e^{-ika} + \rho e^{ika} = Ae^{-\chi a} + Be^{\chi a} \\ ik(e^{-ika} - \rho e^{ika}) = \chi(Ae^{-\chi a} - Be^{\chi a}) \end{cases}, \begin{cases} Ae^{\chi a} + Be^{-\chi a} = \tau e^{ika} \\ \chi(Ae^{\chi a} - Be^{-\chi a}) = ik\tau e^{ika} \end{cases}.$$

Si ricavano A *e* B *dal secondo sistema e si inseriscono nel primo ad ottenere un sistema lineare nelle due incognite* ρ *e* τ*. Con semplice algebra si ottiene*

$$\rho = \frac{(\chi^2 + k^2)\, S\, e^{-2ika}}{2i\chi k\, C + (k^2 - \chi^2)\, S}$$

$$\tau = \frac{2i\chi k e^{-2ika}}{2i\chi k\, C + (k^2 - \chi^2)\, S}$$

$$\textit{dove} \quad C = \cosh(2ka),\ S = \sinh(2ka)\ .$$

Per il coefficiente di trasmissione si trova in particolare

$$T = |\tau|^2 = \frac{4k^2\chi^2}{4k^2\chi^2 + (k^2 + \chi^2)^2 S^2}\ .$$

Si noti che quando E *tende al valore* V_0 *si trova semplicemente* $T = (1+(ka)^2)^{-1} = (1 + 2mV_0 a^2/\hbar^2)^{-1}$*. Per* $E > V_0$ *si ottiene il risultato per semplice continuazione analitica. Il parametro adimensionale* $\eta = 2mV_0 a^2/\hbar^2$ *è quello che determina la fisica del problema; è evidente che l'effetto tunnel è molto marcato per* $\eta \approx 1$ *mentre per* $\eta \gg 1$ *ci si riconduce alla meccanica classica (vedi la Fig. 6-5 a p. 148).*

PROBLEMA 6.3-29 []Si studi l'ampiezza di trasmissione del problema precedente per $E > V_0$ e $V_0 < 0$. Si verifichi che le singolarità nel piano complesso k, corrispondono con gli stati legati trovati all'inizio del §6.1.2.

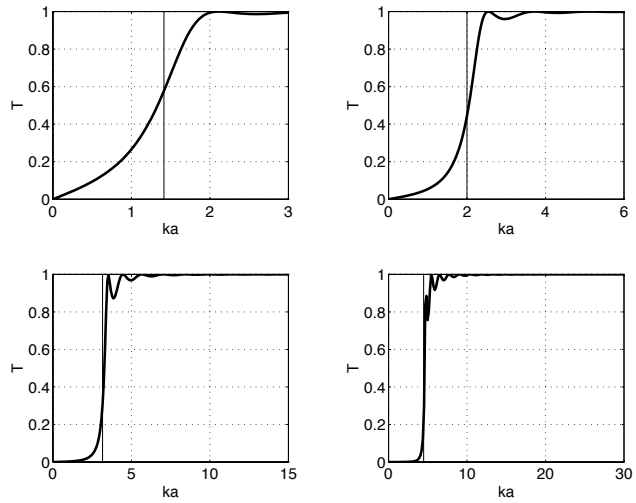


FIGURA 6-5. *Il coefficiente di trasmissione per la barriera rettangolare nei vari casi* $2mV_0a^2/\hbar^2 = 1, 2, 5, 10$.

Track 2

6.3.4. Densità degli stati. Vogliamo ora determinare gli effetti della barriera di potenziale sulla parte continua dello spettro dell'energia. A prima vista non ci sono variazioni rispetto al caso libero in cui $V = 0$: lo spettro continuo si estende su tutti i valori non negativi dell'energia E. Per osservare degli effetti sui livelli energetici è necessario poterli risolvere, cioè "discretizzarli". Questo si ottiene considerando il moto della particella ristretto ad una porzione finita, anche se molto più grande di tutte le altre scale di lunghezza in questione, della retta reale. Il modo più semplice consiste nell'imporre la seguente condizione di periodicità

$$\psi(x + L) = \psi(x)$$

con l'opportuna ridefinizione della norma

$$\|\psi\|^2 = \int_{-L/2}^{L/2} |\psi(x)|^2 \,. \tag{6.27}$$

Le autofunzioni del momento $p = -i\hbar d/dx$ sono le onde piane di periodo L:

$$-i\hbar \frac{d}{dx} e^{ik_n x} = \hbar k_n e^{ik_n x} \,, \quad k_n = \frac{2\pi}{L} n \quad n \in \mathbb{Z} \,.$$

Nella nuova norma (6.27) esse hanno norma finita pari a L.

Consideriamo ora un intervallo Δk grande rispetto alla spaziatura $2\pi/L$ dei livelli. Il numero Δn di livelli in Δk vale evidentemente $\Delta k L/(2\pi)$.

Nel limite $L \to \infty$ possiamo restringere arbitrariamente Δk mantenendo questo numero finito e definire la **densità degli stati**

$$\sigma(k) = \frac{dn}{dk} \simeq \frac{L}{2\pi} \, .$$

Si intende che la grandezza veramente finita è la densità per unità di lunghezza, che vale $1/(2\pi)$. Nel caso libero la Hamiltoniana vale $H = \mathfrak{p}^2/2m$, per cui possiamo riscrivere la densità degli stati relativamente all'energia, $\tilde{\sigma}(E)$, come (si noti che ci sono due livelli di momento per ogni livello di energia)

$$\tilde{\sigma}(E) = 2\sigma(k)\frac{d|k|}{dE} = \sqrt{2m/E}\,\frac{L}{2\pi\hbar}$$

In presenza della barriera di potenziale le autofunzioni di H non sono più autofunzioni di $\mathfrak{p}$, ma possiamo ancora assumere la relazione $E = \hbar^2 k^2/2m$, dove $k \geq 0$ è il numero d'onda che caratterizza una data autofunzione nelle regioni I e III (vedi l'Eq. (6.17)). Ovviamente consideriamo L molto più grande di a, il raggio di azione del potenziale. Quindi imponiamo ancora la periodicità

$$\psi_k(x + L) = \psi_k(x) \, , \quad x < -a \, , \; x + L > a \, ,$$

ovvero

$$F, e^{ikx+ikL} + G\, e^{-ikx-ikL} = A\, e^{ikx} + B\, e^{-ikx} \, .$$

Tenendo conto della definizione della matrice $\boldsymbol{S}$ (Eq. (6.26)) si ottiene allora la relazione

$$\begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix} = e^{ikL} \begin{pmatrix} F \\ B \end{pmatrix} = e^{ikL} \boldsymbol{S} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix} \, .$$

L'interpretazione fisica è immediata: con le condizioni di periodicità la particella si muove effettivamente su un cerchio di circonferenza L; in un giro attorno al cerchio la funzione d'onda raccoglie il fattore di fase e^{ikL} ed in più subisce lo scattering dalla barriera di potenziale; i due effetti combinati assieme riproducono la stessa funzione d'onda iniziale dato che un giro intero sul cerchio equivale allo spostamento nullo. Otteniamo così una semplice equazione agli autovalori per la coppia A, G, nella quale e^{-ikL} gioca il ruolo di autovalore. Siano $e^{i\xi_+(k)}$ e $e^{i\xi_-(k)}$ i due autovalori di $\boldsymbol{S}$ (si ricordi che tale matrice è unitaria). Allora abbiamo due distinte regole di quantizzazione per k (che per costruzione è non negativo)

$$kL + \xi_\pm(k) = 2\pi n_\pm \, ,$$

dove gli interi $n_\pm$ sono vincolati solo dalla richiesta $k \geq 0$. Ad esempio, se $S_{12} = S_{21}$, allora gli autovettori hanno $G = \pm A$. Quindi nel limite di potenziale nullo ($\xi_\pm(k) \to 0$) riotteniamo la quantizzazione libera con $n_+ = 0, 1, 2 \ldots$ e $n_- = 1, 2 \ldots$, mentre le corrispondenti autofunzioni sono $\cos kx$

e $\sin kx$. Si tratta semplicemente di una base diversa rispetto alle onde $e^{\pm ikx}$; il fatto che tale base (o un'altra ancora se $S_{12} \neq S_{21}$) sia selezionata nel limite di interazione nulla è un esempio caratteristico della teoria delle perturbazioni di stati degeneri ($e^{\pm ikx}$ in questo caso; vedi §10.1.3).

PROBLEMA 6.3-30 [] Si risolva l'Eq. (6.3.4) nel caso del potenziale singolare $V(x) = \lambda\delta(x)$. Si osservino gli spostamenti dei livelli rispetto $\lambda = 0$, nei due casi $\lambda > 0$ e $\lambda < 0$.

Nel limite $l \to \infty$ l'Eq. (6.3.4) ci fornisce la densità degli stati nei due canali $\pm$ che diagonalizzano lo scattering

$$\begin{aligned} \sigma_\pm(k) &= \frac{dn_\pm}{dk} = \frac{L}{2\pi} + \Delta\sigma_\pm(k) \\ \Delta\sigma_\pm(k) &= \frac{1}{2\pi}\frac{d}{dk}\xi_\pm(k) \ . \end{aligned} \tag{6.28}$$

L'effetto del potenziale è evidentemente di ordine $1/L$ rispetto alla densità nel caso libero ed è quindi trascurabile esattamente a $L = \infty$, come previsto. D'altra parte $\Delta\sigma_\pm(k)$ contiene tutte le informazioni sullo scattering. In particolare la variazione della densità degli stati serve a mantenere invariato il numero totale degli stati (anche se infinito). Per dimostrarlo, determiniamo innanzitutto una relazione tra tale somma e l'operatore risolvente $(H - E)^{-1}$ a $L = \infty$, cioè sull'intera retta reale. Per costruzione l'Hamitoniana H possiede la semiretta $E > 0$ come spettro continuo, per cui $(H - E)^{-1}$ ha tale semiretta come taglio sul piano complesso E. La discontinuità attraverso il taglio vale allora

$$\frac{1}{H - E - i\epsilon} - \frac{1}{H - E + i\epsilon} = 2\pi i\delta(H - E) \ ,$$

grazie alle note formule di Plemely

$$\frac{1}{x \pm i\epsilon} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\delta(x) \ .$$

La traccia di $\delta(H - E)$ sull'intero spazio di Hilbert rappresenta evidentemente la definizione naturale di densità degli stati relativamente all'energia. Si tratta di una definizione puramente formale però, dato che la densità degli stati relativa sia al numero d'onda k che all'energia $E = \hbar^2k^2/(2m)$ diverge come L (vedi Eq. (6.28)). Ciò che esiste finita anche al limite $l \to \infty$ è la variazione

$$\Delta\sigma(E) = [\Delta\sigma_+(k) + \Delta\sigma_-(k)]\frac{dk}{dE} \ . \tag{6.29}$$

Deve quindi valere la relazione, per E reale e positivo,

$$\Delta\sigma(E) = \frac{1}{2\pi i}\mathrm{Tr}\,[\Delta G(E + i\epsilon) - \Delta G(E - i\epsilon)] \ ,$$

dove $\Delta G(E)$ è la variazione dell'operatore risolvente rispetto alla particella libera ($H_0 = p^2/(2m)$)

$$\Delta G(E) = \frac{1}{H - E} - \frac{1}{H_0 - E} \ .$$

Per calcolare la traccia potremmo per esempio fare uso del **propagatore** $G(x, y|E) = \langle x| (H - E)^{-1} |y\rangle$ che soddisfa l'equazione inomegenea

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - E \right] G(x, y|E) = \delta(x - y) \ .$$

Quindi abbiamo

$$\mathrm{Tr}\, \Delta G(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, \left[G(x, x|E) - G_0(x, x|E) \right] \ .$$

Si noti che la discontinuità in E degli elementi di matrice diagonali del propagatore $G(x, x|E)$ fornisce $2\pi i$ volte la densità degli stati per unità di lunghezza, che è una quantità finita nel limite $L \to \infty$. Si noti anche che tutte queste considerazioni si estendono senza reali modifiche dal caso della particella in una dimensione a contesti molto più generali.

Consideriamo ora l'integrale di $\Delta\sigma(E)$ da 0 a ∞. Esso coincide evidentemente con l'integrale di $\Delta G(E)$ attorno al taglio in $E > 0$; ma dato che $\Delta G(E)$ è una funzione analitica di E che tende abbastanza rapidamente a zero per $|E| \to \infty$, possiamo deformare il cammino di integrazione fino a ridurlo ad un contorno chiuso, percorso in senso orario, che racchiude tutti gli eventuali poli di $(H - E)^{-1}$ sulla semiretta reale negativa. Tali poli corrispondono proprio agli stati legati di H ed il teorema dei residui ci fornisce immediatamente il risultato

$$\int_0^{\infty} dE \, \Delta\sigma(E) = -\nu \ , \tag{6.30}$$

dove ν è appunto il numero complessivo di stati legati (includendo le eventuali degenerazioni, che, come sappiamo, non sono possibili in una dimensione, ma potrebbero esserci in più dimensioni). La relazione (6.30) afferma la conservazione del numero complessivo degli stati, anche se infinito, nel passaggio dalla propagazione libera a quella nel potenziale V capace di formare ν stati legati.

Ricordando la relazione (6.28) tra densità degli stati e gli **sfasamenti** di scattering $\xi_\pm(k)$, otteniamo l'affermazione del **teorema di Levinson**

$$\nu = \nu_+ + \nu_- \ , \quad \nu_\pm = \xi_\pm(k = 0) - \xi_\pm(k = \infty) \ .$$

Nel caso di potenziali pari, $V(x) = V(-x)$, i due canali di scattering $\pm$ corispondono alle autofunzioni pari e dispari, $\psi(x) = \pm\psi(\pm x)$. Allora ν_+ e ν_- sono anch'essi interi e rappresentano il numero di stati legati pari e dispari, rispettivamente. L'estesione del teorema di Levinson ai problemi

di scattering con simmetria centrale in tre dimensioni non presenta difficoltà; in tal caso i canali di scattering corrispondono alla decomposizione in onde sferiche parziali (vedi §12.2). Per una dimostrazione esplicita, che utilizza le proprietà analitiche degli sfasamenti e l'integrazione per contorni in campo complesso, si veda ad esempio [**GP90**].

PROBLEMA 6.3-31 []Si determini la forma esplicita della variazione ΔG del propagatore nel caso del potenziale singolare $V(x) = \lambda\delta(x)$, verificando sia la relazione (6.29) con la densità degli stati calcolata a partire dallo sfasamento di scattering (vedi Probl. 6.3-30 a p. 150) che il teorema di Levinson.

6.4. Potenziali periodici

Track 1

Una delle applicazioni più importanti della meccanica ondulatoria riguarda la fisica dei solidi; è proprio nello studio delle proprietà magnetiche, vibrazionali e di conduzione che la nuova meccanica permette di descrivere tutta una serie di fenomeni che non trovano nella meccanica classica neppure un *linguaggio* adeguato. Il problema più semplice da cui si può iniziare lo studio delle proprietà elettroniche nei solidi cristallini è quello schematizzzato in termini di una particella che sia soggetta a un potenziale periodico. Si tratta di una idealizzazione matematica, se non altro perché ogni campione cristallino ha lunghezza finita, tuttavia è un modello più facilmente affrontabile analiticamente che non, poniamo, un potenziale che presenti un numero finito di buche di potenziale regolarmente distanziate. Supponiamo dunque che il potenziale $V(x)$ soddisfi la condizione $V(x+L) = V(x)$. Ne segue che, dette $u(x), v(x)$ due soluzioni linearmente indipendenti dell'equazione di Schroedinger, con $u(0) = 1, u'(0) = 0$ e $v(0) = 0, v'(0) = 1$, si dovrà avere

$$\begin{cases} u(x+L) = au(x) + bv(x) \\ v(x+L) = cu(x) + dv(x) \end{cases}$$

e la matrice $\Omega = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ ha determinante uguale a uno per il teorema di Wronski. Si noterà a questo punto che la natura del problema matematico è esattamente la stessa di quella considerata nel §3.2.2. Sulla scorta dei risultati ottenuti allora possiamo concludere che se il parametro $\Delta = u(L) + v'(L)$ è in modulo inferiore a 2, il caso di stabilità nel problema meccanico, le soluzioni saranno quasi-periodiche: potremo individuare cioè due soluzioni $\phi_\pm$ tali che

$$\phi_\pm(x+L) = e^{\pm ikL}\phi_\pm(x)$$

con k reale; la condizione $|\Delta| < 2$ equivale infatti a richiedere che la matrice Ω abbia autovalori complessi di modulo unitario. Se al contrario $|\Delta| > 2$, le soluzioni sono esponenzialmente crescenti (il caso della risonanza parametrica) e quindi non corrispondono a stati quantistici. Ora, la matrice Ω e quindi il parametro Δ contengono E e pertanto la disuguaglianza individua intervalli di energia permessi e intervalli proibiti. Si dice che lo spettro presenta **bande di energia**. Il risultato che abbiamo ottenuto è noto ai matematici come "teorema di Floquet" (si veda [**Hoc71**] per gli aspetti elementari e [**MW66**] per la teoria generale) e ai fisici come **teorema di Bloch**. È possibile rendersi conto intuitivamente della formazione delle bande d'energia rifacendoci a un problema già considerato in precedenza (vedi Probl. 6.3-27 a p. 146). Se abbiamo due buche di potenziale separate da una distanza L lo stato fondamentale tende a essere degenere per L molto grande; si forma un doppietto di livelli energetici separati da un gap di cui è responsabile l'effetto tunnel. Ora se le buche di potenziale sono N a distanza $L, 2L, 3L, \ldots$ gli stati si dispongono in multipletti di N livelli che sarebbero degeneri a $L \to \infty$. Per $N \to \infty$ questi multipletti tendono ad addensarsi e formano bande continue di energia.

Osservazione *[]Il gruppo di simmetria di un potenziale periodico è dato dal* gruppo discreto infinito $\mathfrak{T} = \{T^n | n \in \mathbb{Z}\}$ *formato dalle traslazioni di multipli di* L. *Il gruppo è* abeliano *e quindi le sue rappresentazioni unitarie irriducibili sono monodimensionali, ossia* $T \to \exp\{i\phi\}$. *Deve pertanto essere possibile costruire una base di autovettori (generalizzati) dell'energia tali che per ogni autovettore si abbia*

$$T\,|\psi\rangle = e^{i\phi}\,|\psi\rangle \ .$$

Detto allora $k = \phi/L$, *la funzione* $\psi(x)\exp\{-ikx\}$ *risulta essere periodica, il che costituisce l'usuale formulazione del teorema di Bloch:* le autofunzioni generalizzate dell'equazione di Schroedinger in campo periodico sono date da

$$\psi_k(x) = \exp\{ikx\}u_k(x)\,,$$

dove $u_k(x + L) = u_k(x)$.

PROBLEMA 6.4-32 []Determinare le bande di energia per un potenziale periodico della forma

$$V(x) = \lambda \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(x - (n + \tfrac{1}{2})L\right) \ .$$

SOLUZIONE *[]Si tratta di valutare la matrice Ω risolvendo l'equazione di Schroedinger nell'intervallo fondamentale $(0, L)$. Le soluzioni u, v sono date da*

$$u(x) = \begin{cases} \cos(kx) & \textit{per } 0 < x < L/2 \\ A\cos(kx) + B\sin(kx)/k & \textit{per } L/2 < x < L \end{cases}$$

$$v(x) = \begin{cases} \sin(kx)/k & \textit{per } 0 < x < L/2 \\ C\cos(kx) + D\sin(kx)/k & \textit{per } L/2 < x < L \end{cases}$$

dove $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. *Le costanti* A, B, C, D *si determinano imponendo le condizioni di raccordo in* $x = L/2$ *(ricordare l'Eq.* (6.24)*), e infine si calcola* $\Delta = u(L)+v'(L) = 2\cos(kL) + 2m\lambda/k\hbar^2 \sin(kL)$. *Le bande di energia sono allora individuate dagli intervalli in cui*

$$\left|\cos(kL) + \frac{m\lambda}{k\hbar^2}\sin(kL)\right| < 1 \ .$$

Un calcolo più rapido si può impostare nel modo seguente: l'obiettivo è quello di determinare soluzioni quasi periodiche, tali cioè che $\psi(x + L) = \omega\psi(L)$ *con* $|\omega| = 1$. *Conviene effettuare una traslazione di* $L/2$ *in modo che le barriere siano nei punti* nL*; si può allora porre*

$$\psi(x) = \begin{cases} A\cos kx + B\sin kx & \textit{per } 0 < x < L \\ \omega\left(A\cos k(x-L) + B\sin k(x-L)\right) & \textit{per } L < x < 2L \end{cases}$$

su cui imponiamo le condizioni di raccordo in $x = L$*; con calcoli immediati si trova*

$$k\omega^2 - \left(2k\cos KL + \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\sin KL\right)\omega + k = 0$$

che porta alla medesima conclusione.

PROBLEMA 6.4-33 [] Determinare le bande di energia per un potenziale periodico della forma

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{per } 0 < x < a \\ 0 & \text{per } a < x < L \end{cases} = V(x + L) \ .$$

SOLUZIONE *[]Le bande di energia per* $E < 0$ *sono date dalla disequazione* $|\Delta| < 2$*, con*

$$\tfrac{1}{2}\Delta = \cos ka \cosh \kappa(L-a) + \tfrac{1}{2}(\kappa/k - k/\kappa)\sin ka \sinh \kappa(L-a) \ ,$$

dove $\hbar\kappa = \sqrt{-2mE}$, $\hbar k = \sqrt{2m(E + V_0)}$. *La soluzione è mostrata graficamente in Fig. 6-6. Per le applicazioni, si veda* [**FR95**]*, cap. 3.5.*

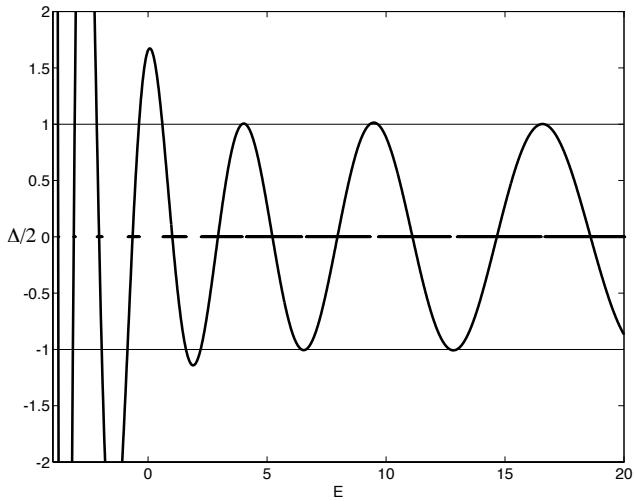


FIGURA 6-6. *Le bande di energia per il modello più semplice di potenziale periodico.*

6.5. Campo di forze centrali

6.5.1. Separazione delle variabili in coordinate polari. L'equazione di Schroedinger nel caso di campo di forze centrali si risolve agevolmente in coordinate polari, in modo analogo alle altre equazioni alle derivate parziali della fisica matematica. Sia $V(r)$ l'energia potenziale. Allora l'equazione si scrive (ricordando l'espressione dell'operatore di Laplace (4.7)) Track 1

$$\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\Psi) + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(r)\right)\Psi = 0\,.$$

Le autofunzioni si ottengono separando le variabili, cioè ponendo $\Psi(r,\vartheta,\varphi) = \mathcal{R}(r)Y(\vartheta,\varphi)$; l'equazione per la parte angolare è identica alla prima delle equazioni (4.8), e quindi la soluzione è data dalle **armoniche sferiche** $Y_l^m(\vartheta,\varphi)$ introdotte nel §4.1.3. Ricordiamo che, opportunamente normalizzate, le Y_l^m formano un insieme ortonormale completo per le funzioni definite sulla superficie della sfera (si veda l'Eq. (4.9)). L'equazione radiale assume la forma

$$\frac{1}{r}(r\mathcal{R}(r))'' - \frac{l(l+1)}{r^2}\mathcal{R}(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(V(r) - E\right)\mathcal{R}(r) = 0\,.$$

Il problema si riconduce pertanto a quello di una particella in un solo grado di libertà soggetta ad un **potenziale efficace**

$$V_{\text{eff}}(r,l) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} ,$$

e con funzione d'onda $u(r) = r\mathcal{R}(r)$. Si noti l'analogia con il caso classico del §3.4; il significato della correzione centrifuga al potenziale radiale rimane identico in meccanica quantistica: il termine $\hbar^2 l(l+1)$ che prende il posto di ℓ^2 coincide con l'autovalore del (quadrato del) momento angolare. La soluzione dell'equazione radiale

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(r)}{dr^2} + (E - V_{\text{eff}}(r,l))\, u(r) = 0$$

si affronta con le stesse tecniche introdotte nei capitoli precedenti. In particolare se $V(r)$ risulta *costante a tratti* la soluzione sarà ottenibile in ogni regione di potenziale costante in termini di funzioni di Bessel sferiche. Il problema matematico non differisce da quello incontrato al cap. 4; tuttavia è da tenere presente che si deve considerare la soluzione generale $\mathcal{R}(r) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr)$ tranne che nell'intervallo che ha estremo in $r = 0$ dove n_l è singolare ($j_l(x) \sim x^l$, $n_l(x) \sim x^{-l-1}$). Si noti che anche nel caso $l = 0$, in cui non c'è il termine centrifugo, siamo nondimeno tenuti a porre la condizione al contorno $u(0) = 0$ che è indispensabile per mantenere il carattere autoaggiunto[8] dell'operatore $(d/dr)^2$ ristretto alla semiretta $r > 0$.

PROBLEMA 6.5-34 [] Discutere il problema agli autovalori per una particella nel campo di potenziale centrale $V(r) = -V_0 < 0$ per $r < R$ e $V \equiv 0$ altrove.

SOLUZIONE *[]La soluzione è qualitativamente differente nei due casi* $E < 0$ *e* $E > 0$.
a) $E < 0$*: per* $r < R$ *si hanno le soluzioni già note* $j_l(kr), k = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$, *mentre per* $r > R$ *la soluzione è esprimibile in termini di funzioni di Bessel con argomento immaginario: la soluzione si trova con il metodo di Laplace ed è la seguente (§B.6.2)*

$$\psi(r) \propto (kr)^{-l}\frac{\partial^l}{\partial z^l}\left(\frac{e^{zkr}}{(z-1)^{l+1}}\right)\Bigg|_{z=-1}, \quad \kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar\,.$$

[8] L'operatore $-ir^{-1}(\partial/\partial r)\,r$ che rappresenta il momento radiale non è definibile come operatore autoaggiunto; ciò è dimostrabile con il metodo degli indici di difetto [**Nai68**], ma è più direttamente conseguenza del fatto che non esiste una traslazione unitaria $r \to r + a$. Al contrario il momento radiale al quadrato è un operatore autoggiunto, se si impone la condizione di annullamento in $r = 0$.

Ad es. per $l = 0$ *e* $l = 1$ *si ha semplicemente*

$$\psi_{l=0} = \begin{cases} \sin(kr)/kr\,, & r < R \\ \exp(-\kappa r)\,, & r > R. \end{cases}$$

$$\psi_{l=1} = \begin{cases} \dfrac{\sin kr - kr\cos kr}{(kr)^2}\,, & r < R \\ (1 + (\kappa r)^{-1})\,\exp(-\kappa r)\,, & r > R \end{cases}.$$

La condizione di raccordo in $r = R$ *fornisce l'equazione che determina gli autovalori:*

$$kR\cot kR - 1 = -\kappa R, \ \textit{(per } l = 0\textit{)},$$

$$-\frac{\kappa^2 R}{1 + \kappa R} = \frac{2\,k\,R\cos(k\,R) - 2\sin(k\,R) + k^2 R^2 \sin(k\,R)}{-(k\,R^2\cos(k\,R)) + R\sin(k\,R)} \ \textit{(per } l = 1\textit{)}\,.$$

Si noti che il caso $l = 0$ *è equivalente al caso monodimensionale trattato nel §6.1.2, ristretto alle autofunzioni antisimmetriche: ciò implica che esiste un valore di soglia per* V_0 *al di sotto del quale il potenziale non ammette stati legati. Dimostrare che per* $l > 0$ *il valore di soglia è ancora maggiore.*

b) $E > 0$*: questa è la componente dello spettro continuo. Le soluzioni sono date da*

$$\psi_l(r) = \begin{cases} j_l(kr), & r < R \\ A_l\, j_l(\kappa r) + B_l\, n_l(\kappa r), & r > R \end{cases}$$

dove ora $\kappa = \sqrt{2mE}/\hbar$*. Le soluzioni che si ottengono imponendo il raccordo in* $r = R$ *rappresentano l'effetto del potenziale sul moto di una particella che può allontanarsi indefinitivamente dal centro. Si tratta propriamente di un processo d'urto, che studieremo nel cap. 12. Si noti che per* $0 < E < \hbar^2 l(l+1)/2mR^2$ *il potenziale efficace agisce come una barriera di potenziale che divide la zona vicino all'origine da quella in cui la particella è essenzialmente libera. In questa situazione se la particella è inizialmente nella regione interna può filtrare all'esterno attraverso l'effetto tunnel e questo richiede un certo tempo. Si parla di stati metastabili (o risonanze) per quei valori di energia in corrispondenza ai quali questo tempo di fuga risulta massimo. Vedi la Fig. 6-7 dove si può osservare che in corrispondenza a un'energia positiva la funzione d'onda è concentrata in una regione vicino all'origine, ma non si tratta oviamente di uno stato legato, in quanto lo stato non è normalizzabile.*

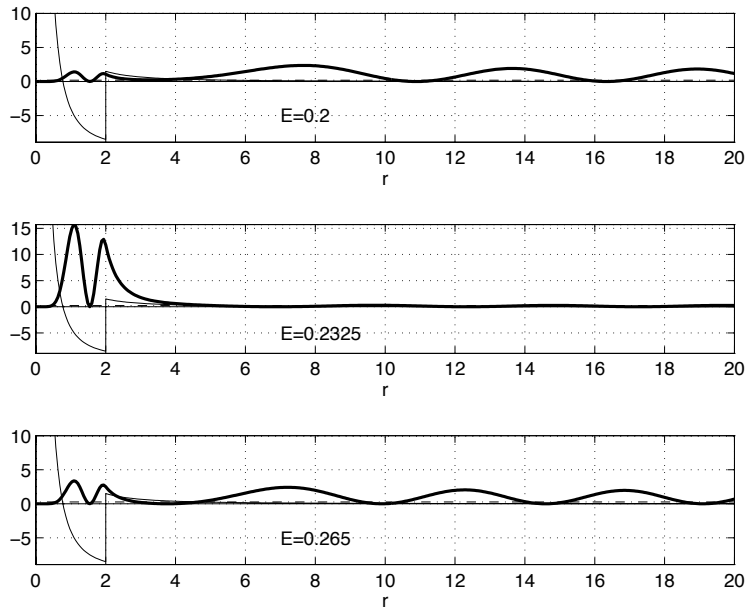


FIGURA 6-7. *Densità radiali per la "buca sferica" del Probl. 6.5-34. Dati del problema:* $m = \hbar = 1$, $l = 3, V_0 = 10, R = 2$.

Track 1

6.6. L'atomo di idrogeno

L'equazione di Schroedinger per un sistema costituito da due particelle (protone ed elettrone) si ricava a partire dalla Hamiltoniana classica che descrive il problema dei due corpi

$$H = \frac{\mathbf{p}_n^2}{2m_n} + \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e} - \frac{e^2}{|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_e|}\,, \tag{6.31}$$

dove i suffissi n, e si riferiscono a *n*ucleo ed *e*lettrone. Si tratta di una prima schematizzazione della fisica degli atomi idrogenoidi; anche per lo stesso atomo di idrogeno vi sono altre interazioni più deboli di quella elettrostatica che si potranno in seguito considerare come piccole correzioni. La funzione d'onda Ψ sarà funzione delle sei variabili $\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_e$, e quindi l'equazione differenziale che ne deriva sostituendo

$$\mathbf{p}_n \to -i\hbar\nabla_n,\ \mathbf{p}_e \to -i\hbar\nabla_e$$

risulterebbe di ardua soluzione, se non fosse che, come in meccanica classica, si può sfruttare tutta la simmetria del problema per ridursi, come

per qualunque campo centrale, ad un problema in un solo grado di libertà. Si tratta innanzitutto di separare il moto del centro di gravità, passando agli operatori canonici (come nel §3.4)

$$\begin{aligned}
\mathbf{P} &= \mathbf{p}_n + \mathbf{p}_e \\
\mathbf{X} &= \frac{m_e \mathbf{x}_e + m_n \mathbf{x}_n}{m_e + m_n} \\
\boldsymbol{\pi} &= \frac{m_n \mathbf{p}_e - m_e \mathbf{p}_n}{m_n + m_e} \\
\mathbf{r} &= \mathbf{x}_e - \mathbf{x}_n \ .
\end{aligned}$$

In termini di questi l'Hamiltoniano diviene semplicemente

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}$$

dove $M = m_e + m_n$ è la massa totale, $\mu^{-1} = m_e^{-1} + m_n^{-1}$ la **massa ridotta**, e $r \equiv |\mathbf{r}|$ è la distanza tra le due particelle. L'equazione di Schroedinger risulta ora separabile, ossia possiamo porre

$$\Psi(\mathbf{X}, \mathbf{r}) = \Xi(\mathbf{X})\psi(\mathbf{r}) \ ,$$

il che porta a due equazioni disaccoppiate. Possiamo però procedere più speditamente riconoscendo il fatto che i gradi di libertà del centro di massa rappresentano una particella libera che sarà descrivibile con onde piane e a cui corrisponde un contributo positivo all'energia pari alla energia cinetica $\mathbf{P}^2/2M$. Gli altri gradi di libertà che rappresentano il moto relativo di elettrone e nucleo costituiscono la dinamica interessante. Scegliamo perciò di metterci nel sistema di riferimento in cui il centro di massa è in quiete: l'equazione da risolvere è quella di Schroedinger in campo centrale

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \triangle \psi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{r}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

che si riduce, dopo avere separato la parte angolare ponendo

$$\psi = Y_l^m(\theta, \phi)u(r)/r$$

ad un'equazione ordinaria

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2} + \left(-\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right) u = Eu \ .$$

Cercheremo le soluzioni corrispondenti a stati legati ($E < 0$). Introduciamo innanzitutto variabili adimensionali attraverso le sostituzioni [9]

$$r = a\xi\,, \quad a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}\,, \quad n = \frac{\mu e^2}{\hbar\sqrt{-2\mu E}}$$

che ci offre l'equazione formalmente più semplice

$$u''(\xi) + \left(-1/n^2 + 2/\xi - l(l+1)/\xi^2\right) u(\xi) = 0\,,$$

L'ulteriore trasformazione $\xi \longrightarrow n\,\xi$ semplifica ulteriormente l'equazione alla sua forma più adatta per procedere alla soluzione:

$$u''(\xi) + \left(-1 + 2\,n/\xi - l(l+1)/\xi^2\right) u(\xi) = 0\,, \tag{6.32}$$

(registriamo che ora la definizione di ξ è data da $r = n\,a\,\xi$). Osserviamo che a è correttamente delle dimensioni di una lunghezza e rappresenta la scala di dimensioni atomiche. Viene denominato **raggio di Bohr** e vale numericamente circa mezzo Å (vedi a p. 519 per il valore preciso). Il parametro n, che nella quantizzazione alla Bohr assume valori interi, al momento è a priori un numero reale positivo arbitrario. La soluzione generale dell'equazione è ottenuta facilmente in termini della funzione **ipergeometrica confluente**, come mostreremo più avanti. Un metodo diretto basato sul metodo di Laplace funziona senza difficoltà nel caso $l = 0$:

$$\xi u''(\xi) + (2n - \xi)u(\xi) = 0$$

$$u(\xi) = \int_{\mathcal{C}} \exp(z\xi)F(z)\,dz \Longrightarrow -\frac{d}{dz}\left((z^2-1)\,F\right) + nF = 0$$

che ha come soluzione

$$F(z) = (1-z)^{n-1}(1+z)^{-n-1}$$

da cui, tenendo conto che n è positivo e che accettiamo solo soluzioni che tendono a zero abbastanza rapidamente per $\xi \to \infty$, otteniamo la soluzione nella forma

$$u(\xi) = \int_{\mathcal{C}} e^{z\xi}\frac{(1-z)^{n-1}}{(1+z)^{n+1}}\,dz$$

e il cammino è da scegliere come indicato in Fig. 6-8 (un laccetto che avvolge il taglio $[-\infty \ldots -1]$). La soluzione tende a zero per $\xi \to \infty$ almeno come $e^{-\xi}$. Rimane però da soddisfare la condizione al contorno di

[9] Le sostituzioni possono apparire misteriose, ma sono suggerite dalle formule di Bohr della vecchia teoria dei quanti, e quindi sono automaticamente corrette dal punto di vista dimensionale.

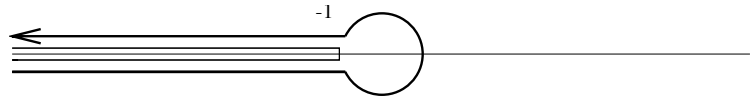


FIGURA 6-8. *Il cammino di integrazione per il calcolo di* $u(\xi)$.

annullamento in $\xi = 0$, comune a tutte le equazioni separate in coordinate polari. Questo ci offre la condizione

$$\int_{\mathcal{C}} \frac{(1-z)^{n-1}}{(1+z)^{n+1}}\, dz = 0 \,.$$

L'integrale è calcolabile in modo elementare attraverso la trasformazione conforme

$$w = \frac{1-z}{1+z}$$

che mappa il cammino $\mathcal{C}$ in un laccetto attorno all'origine:

$$\int_{\mathcal{C}} \frac{(1-z)^{n-1}}{(1+z)^{n+1}}\, dz \propto \int_{\mathcal{C}} w^{n-1}\, dw \propto \frac{\sin n\pi}{n} \,.$$

Se ne conclude che le uniche soluzioni che soddisfano la condizione di annullamento corrispondono a $n = 1, 2, 3, \ldots \in \mathbb{N}$, come previsto dalla vecchia teoria dei quanti. Lo spettro discreto per $l = 0$ coincide con quello di Bohr, dunque. Le corrispondenti autofunzioni sono date da una formula esplicita, in quanto per n intero l'integrale si riduce attraverso la formula integrale di Cauchy a una derivata di ordine n:

$$u(\xi) = \oint e^{z\xi} \frac{(1-z)^{n-1}}{(1+z)^{n+1}} = \left(\frac{\partial}{\partial z}\right)^n \left[e^{z\xi}(1-z)^{n-1}\right]\Big|_{z=-1} \,.$$

È chiaro che la $u(\xi)$ sarà della forma

$$u_n(\xi) = L_n(\xi) e^{-\xi}$$

dove L_n è un polinomio di grado n. Tornando ora al caso generale ($l \geq 0$), questo può essere ricondotto ad una forma solubile attraverso il metodo di Laplace attraverso la sostituzione suggerita dallo schema generale dell'App. B.6.1.

$$u(\xi) = \xi^{l+1} e^{-\xi} f(\zeta), \;\; \zeta = 2\xi \,.$$

Ne risulta l'equazione

$$\zeta f'' + (2(l+1) - \zeta) f' + (n - l - 1) f = 0 \,.$$

Si conclude che la soluzione generale dell'equazione radiale per il campo Coulombiano è data da

$$u(\xi) = \xi^{l+1} e^{-\xi} \left(c_1 \, {}_1F_1(l+1-n, 2(l+1); 2\xi) \right.$$
$$\left. + \, c_2 \, \xi^{-1-2l} \, {}_1F_1(-n-l, -2l; 2\xi) \right) .$$

Dovremo subito porre $c_2 = 0$, per la condizione di annullamento in $r = 0$, mentre la forma asintotica della ${}_1F_1$ (si veda l'Eq. (B.3)) ci impone di cancellare il coefficiente del contributo principale che darebbe una crescita esponenziale alla funzione d'onda. Si trova allora

$$\frac{\Gamma(2(l+1))}{\Gamma(l+1-n)} = 0 .$$

Ricordando che $1/\Gamma(z)$ è una funzione intera con zeri semplici nei punti $z = 0, -1, -2, \ldots \in -\mathbb{N}$, se ne conclude che

$$n = l+1, l+2, l+3, \ldots .$$

Troviamo perciò che lo spettro degli stati legati dell'atomo d'idrogeno è dato dalla formula di **Balmer**

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}$$

che coincide fortuitamente con la formula che si ottiene applicando la regola di Bohr nella sua formula più elementare[10]. Si noti che per ogni valore di n (detto il **numero quantico principale**) esistono n^2 stati linearmente indipendenti con la medesima energia; infatti nella formula di Balmer non entra il numero quantico l che può assumere tutti i valori $l = 0, 1, \ldots, n-1$ e per ogni valore di l esistono $2l+1$ stati corrispondenti al numero quantico m che individua la funzione $Y_l^m(\theta, \phi)$; la somma dei primi $n-1$ numeri dispari dà appunto n^2. Questa grossa degenerazione dello spettro dell'atomo di idrogeno è tipica del potenziale Coulombiano e viene rimossa da contributi aggiuntivi al potenziale, come vedremo[11]. Quanto alle autofunzioni, dato che l'ipergeometrica confluente si riduce a un polinomio se il primo parametro è intero non positivo, la loro forma è particolarmente semplice. Applicando il metodo di Laplace si trova facilmente

$$f(\zeta) = \left(\frac{d}{dz} \right)^{n-l-1} \left(e^{\zeta z} (1-z)^{l+n} \right) |_{z=0} .$$

[10] Un'altra coincidenza che, come quella della formula di Rutherford, ha facilitato il compito dei fisici.

[11] Pauli e Fock hanno mostrato che questa degenerazione non è affatto accidentale, ma è legata ad una particolare simmetria dell'Hamiltoniano, descritta dal gruppo delle rotazioni in quattro dimensioni (vedi [**Foc35, BI66, OP72, Ono75**]); come nel corrispondente problema di meccanica classica questa simmetria è associata all'esistenza di costanti del moto tipiche del potenziale di Coulomb – vedi l'(3.19)

$u_{10} = 2\,r\,e^{-r}$	
$u_{20} = \sqrt{\frac{1}{2}}\,r\,e^{-r/2}\,(1 - \frac{1}{2}r)$	$u_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}}\,r^2\,e^{-r/2}$
$u_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3}}\,r\,e^{-r/3}\,(1 - \frac{2}{3}r + \frac{2}{27}r^2)$	$u_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6}}\,r^2\,e^{-r/3}\,(1 - \frac{1}{6}r)$
$u_{40} = \frac{1}{4}r\,e^{-r/4}\,(1 - \frac{3}{4}r + \frac{1}{8}r^2 - \frac{1}{192}r^3)$	$u_{41} = \frac{\sqrt{5/3}}{16}\,r^2\,e^{-r/4}\,(1 - \frac{1}{4}r + \frac{1}{80}r^2)$

TABELLA 6-1. *La parte radiale delle autofunzioni dei livelli più bassi dell'atomo di idrogeno* u_{nl}.

numero quantico l	0	1	2	3	4	5	...
serie spettroscopica	s	p	d	f	g	h	...

TABELLA 6-2. *Denominazione dei livelli idrogenoidi.*

Questi polinomi sono identificabili con **polinomi di Laguerre**, e precisamente

$$u_{nl}(\xi) = \mathcal{N}_{nl}\xi^{l+1}e^{-\xi}\,L_{n+l}^{2l+1}(2\xi)$$

$$N_{nl} = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{an^2[(n+l)!]^3}}$$

(vedi [**Hoc71, CS64**][12]). La Tab. 6-1 riporta le autofunzioni per gli stati legati per piccoli valori di n. La Tab. 6-2 riporta la tradizionale convenzione degli spettroscopi che associano gli stati di momento angolare l a una lettera secondo la successione[13] *s, p, d, f, ...* Ad esempio lo stato ${}_1S$ corrisponde $n = 1, l = 0$, ${}_2P$ a $n = 2, l = 1$, etc.

Le autofunzioni $u_{nl}(r)$ sono convenientemente rappresentate in Mathematica[14] da

```
CoulombU[x_,n_,l_]:=Sqrt[Gamma[n-l]/(n^2*Gamma[n+l+1])]*
  Exp[-x/n]*(2 x/n)^(l+1)*LaguerreL[n-l-1,2*l+1,2*x/n].
```

[12] Si presti attenzione al fatto che esistono convenzioni differenti sulla definizione di L_n^α. Quella del Gradshteyn [**GR65**] corrisponde a $L_n^\alpha(x) = \binom{n+\alpha}{n}{}_1F_1(-n, \alpha+1, x)$, mentre la convenzione adottata in molti libri di testo, incluso il presente, corrisponde a $L_n^\alpha(x) = n!\binom{n}{\alpha}{}_1F_1(-n+\alpha, \alpha+1, x)$.

[13] Per chi avesse curiosità riguardo all'origine dei simboli $s, p, \ldots$ ricordiamo che questi provengono dalla denominazione *sharp, principal, diffuse, fundamental,...* assegnata alle serie di righe spettrali.

[14] ©Wolfram Research [**Wol92**].

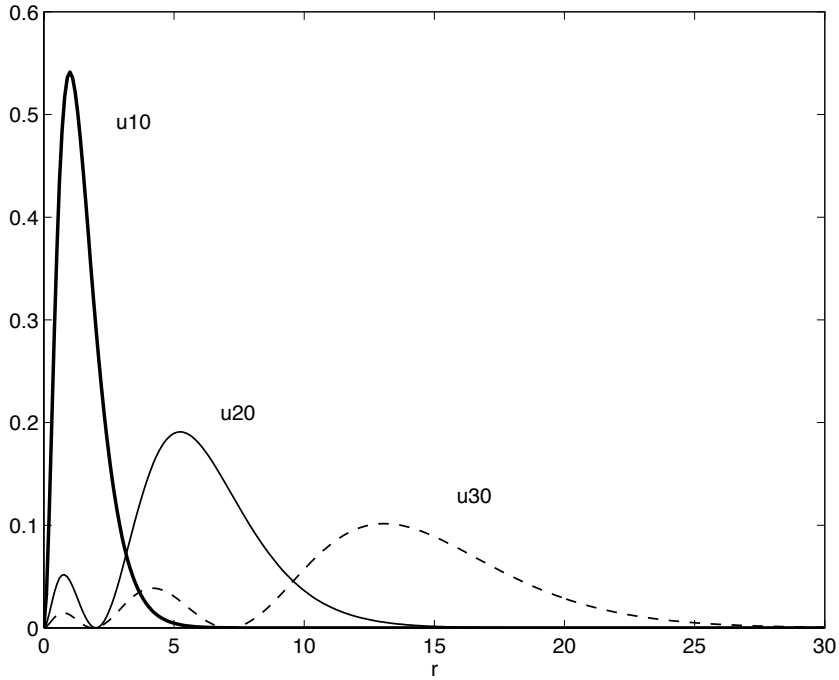


FIGURA 6-9. *Le densità radiali* u_{nl}^2 *per le prime autofunzioni dell'atomo di idrogeno (onda* s*).*

PROBLEMA 6.6-35 [] Calcolare i valori di aspettazione $\langle u_{nl}| r^{-n} |u_{nl}\rangle$.

SOLUZIONE *[]Il calcolo diretto coinvolge integrali non del tutto elementari (si vedano* [**CS64, BS57**]*). Si può procedere invece per via ricorsiva. Dalla relazione* (5.45)*, indicando* $I_k \equiv \langle r^k \rangle$*, si ottiene per* $V = -e^2/r + \hbar^2 l(l+1)/2mr^2$

$$-k\,E_n I_{k-1} + e^2(\tfrac{1}{2} - k)\,I_{k-2} = \frac{\hbar^2}{2\mu}(k-1)[k(k-2)/4 - l(l+1)]I_{k-3}\ .$$

Conviene introdurre unità atomiche, per cui nel seguito nella espressione per $\langle r^{-k} \rangle$ *è sottinteso un fattore* a^{-k}*, dove* a *è il raggio di Bohr. La relazione di ricorrenza è quindi semplicemente*

$$k\left[l(l+1) - (k^2-1)/4\right] I_{-k-2} = (2k-1)\,I_{-k-1} - \frac{k-1}{n^2}\,I_{-k}\ .$$

Per innescare la relazione di ricorrenza si tiene conto del teorema del viriale secondo cui $\langle r^{-1} \rangle = 2E = n^{-2}$*. Facciamo poi ricorso al teorema di Feynman-Helmann (vedi §10.1.2), applicato al problema radiale: tenendo fisso il numero*

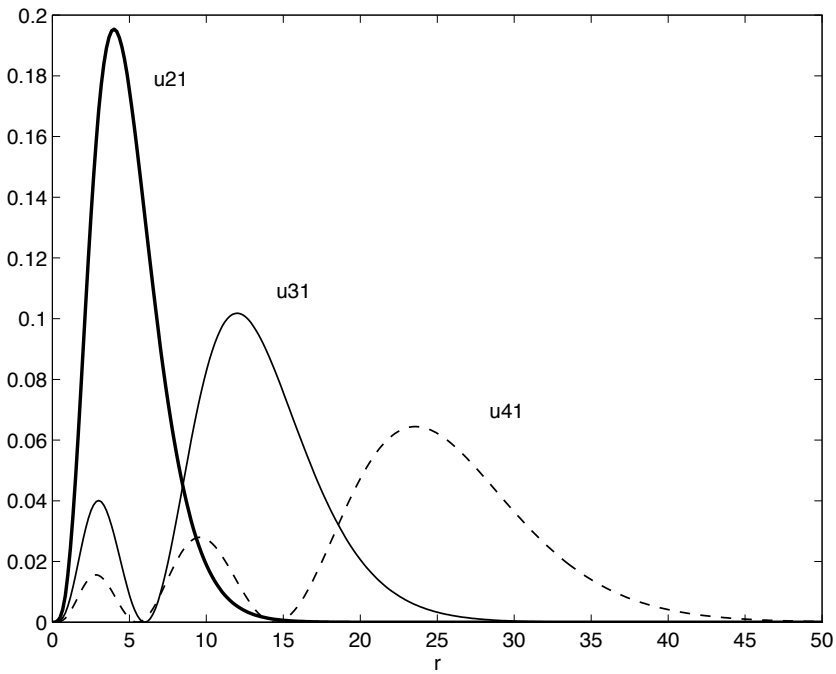


FIGURA 6-10. *Le densità radiali* u_{nl}^2 *per le prime autofunzioni dell'atomo di idrogeno (onda* p*).*

quantico radiale n_r*, l'autovalore è dato da* $E = -1/2\,(n_r + l + 1)^{-2}$ *e perciò*

$$\frac{\partial E}{\partial l} = \frac{1}{(n_r + l + 1)^3} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial l} \right\rangle = \frac{2l+1}{2} \left\langle r^{-2} \right\rangle \ .$$

Si ha dunque

$$\left\langle r^{-2} \right\rangle = \frac{1}{(l + \frac{1}{2})\, n^3} \ .$$

Dalla relazione di ricorrenza si ha poi, partendo da $k = 0$*,*

$$I_{-3} = \frac{I_{-2}}{l(l+1)} = \frac{1}{n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)}$$

$$I_{-4} = \frac{3n^2 - l(l+1)}{2n^5(l-\frac{1}{2})l(l+\frac{1}{2})(l+1)(l+\frac{3}{2})} \ .$$

Si noti che $\left\langle r^{-k} \right\rangle$ *è definito solo se* $k < 2l + 3$ *.*

PROBLEMA 6.6-36 []Determinare i valori di aspettazione $\left\langle r^k \right\rangle$ per $k > 0$ applicando il metodo del problema precedente.

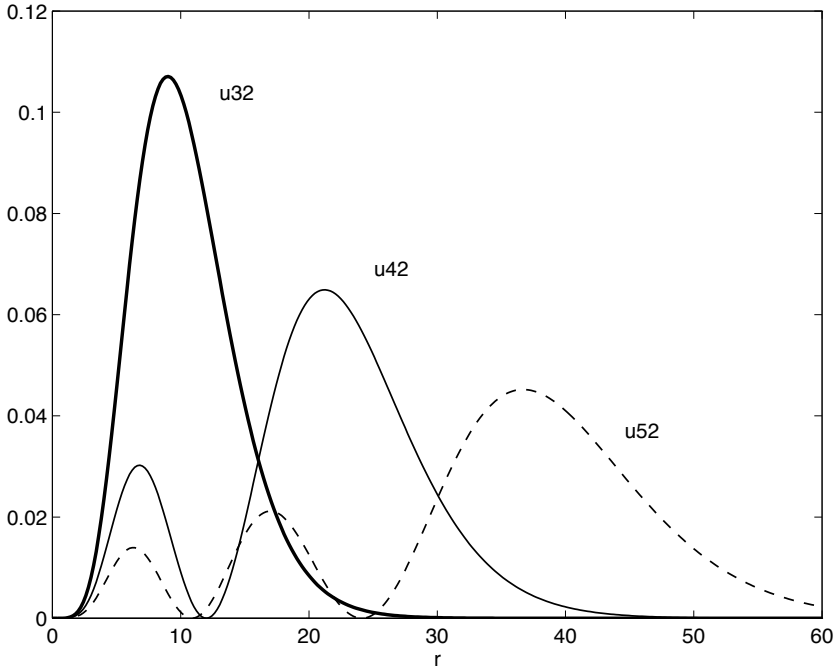


FIGURA 6-11. *Le densità radiali* u_{nl}^2 *per le prime autofunzioni dell'atomo di idrogeno (onda* d*).*

CAPITOLO 7

Lo sviluppo formale della meccanica quantistica

I fenomeni fisici e la relativa descrizione matematica presentati nei capitoli precedenti impongono una revisione radicale di buona parte dei principi fondamentali della fisica. In questo capitolo ci occuperemo proprio di questo, cercando di presentare la struttura formale della meccanica quantistica come risultato di un approccio di tipo operativo sostenuto da alcuni postulati teorici fondamentali. Si tratta cioè di un approccio assiomatico minimale, dove il riferimento a preconcetti teorici è ridotto al minimo e, laddove inevitabile, è esplicitamente dichiarato sotto forma, appunto, di postulati di base. Il risultato è un impianto teorico molto generale della meccanica quantistica, per nulla vincolato a priori al mondo dei fenomeni microscopici. In effetti per tutto il capitolo faremo riferimento ad un generico sistema fisico $\mathcal{S}$, senza specificarne a priori le dimensioni e le caratteristiche. La motivazione per questo è duplice: da un lato si tratta di appagare la naturale esigenza di semplicità e universalità dei fondamenti teorici della fisica, dall'altro va ricordato che la piccolezza del quanto d'azione, la costante di Planck $\hbar$, non restringe per forza l'osservabilità degli effetti propriamente quantistici al dominio del mondo atomico e subatomico. Fenomeni macroscopici classicamente inspiegabili, come la superfluidità, la superconduttività e l'effetto Hall discreto, hanno ricevuto negli ultimi decenni una spiegazione di tipo puramente quantomeccanico, fornendo un importante esempio di come i principi fondamentali della meccanica quantistica possano superare indenni il passaggio dal microcosmo alle scale dell'esperienza quotidiana. Ciò non toglie che proprio questo passaggio ancor oggi costituisca il momento più difficile della meccanica quantistica riguardo la sua accettazione come teoria fisica universalmente valida.

Track 2

7.1. Sistemi fisici, stati e osservabili

La nozione di sistema fisico non può essere formulata in termini rigorosi, dovendo risultare adattabile alle più svariate situazioni. Noi definiremo comunque un sistema fisico $\mathcal{S}$ come una porzione dell'universo isolata o soggetta a ben controllabili influenze esterne, sulla quale è possibile compiere esperimenti quantitativi. I risultati di tali esperimenti sono le

osservazioni, o misure, la cui precisione dipende ovviamente dal grado di raffinatezza degli apparati sperimentali. Per definizione, l'oggetto delle misurazioni sone le **osservabili**, ovvero le grandezze fisiche le cui proprietà e valori caratterizzano il sistema $\mathcal{S}$[1]. Più precisamente, esiste una nozione operativa di osservabile, che potremmo al limite identificare come una classe di equivalenza di esperimenti, ed una nozione matematica, la quale deve fornire una rappresentazione degli eventi che possono verificarsi come risultati di quegli esperimenti. In questo paragrafo consideriamo le osservabili innanzitutto in senso operativo.

Ogni elemento oggettivo d'informazione sul sistema fisico $\mathcal{S}$ discende esclusivamente dalle suddette osservazioni ed il complesso dei risultati sperimentali disponibili sulle osservabili di $\mathcal{S}$ definisce lo *stato fisico*, o **stato** *tout court*, di $\mathcal{S}$. Tipicamente, tra le osservabili si possono distinguere alcune osservabili "fondamentali", la cui natura e proprietà sono sufficienti a caratterizzare il sistema in esame, nel senso di fissare interamente l'insieme degli stati possibili di $\mathcal{S}$ (una precisazione su cosa effettivamente si intende per osservabili fondamentali verrà fornita in seguito, per ora il significato letterale è sufficiente). D'altra parte, in uno specifico stato, non tutte le osservabili di $\mathcal{S}$, e neppure tutte quelle fondamentali, assumono valori determinati. Una prima, ovvia ragione è che spesso il numero delle osservabili fondamentali di $\mathcal{S}$ è troppo grande, ed in uno stato sperimentalmente accessibile soltanto una parte di esse viene direttamente od indirettamente misurata. Una seconda ragione è dovuta al potere risolutivo degli apparati di misura, che è necessariamente finito e, come tale, non permette di determinare il valore esatto di osservabili che possono assumere valori distinti arbitrariamente vicini. Si pensi alla distribuzione di valori che può assumere la posizione del baricentro di un oggetto materiale: allo stato attuale delle nostre conoscenze, possiamo assumere che sia continua. Infine vi possono essere veri e propri impedimenti di principio verso la determinazione dei valori assunti contemporaneamente da più osservabili. Quest'ultimo è proprio il caso dei fenomeni quantomeccanici e determina la principale deviazione dal modo di pensare proprio della fisica pre-quantistica, convenzionalmente indicata come "fisica classica".

Dunque lo stato fisico rappresenta una più o meno concentrata distribuzione di probabilità sullo spazio dei valori che ciascuna osservabile può sperimentalmente assumere: la ripetizione N volte dei medesimi esperimenti sul sistema $\mathcal{S}$ ripreparato ogni volta in condizioni identiche (per quanto riguarda quelle sperimentalmente rilevanti), fornisce una sequenza di risultati diversi per le osservabili sotto esame, con una frequenza relativa che riproduce, nel limite $\mathsf{N} \to \infty$, la distribuzione di probabilità che

[1] Si noterà una certa, inevitabile circolarità dell'argomento: un sistema fisico è di fatto definito dalle osservabili che gli risultano sperimentalmente pertinenti.

corrisponde allo stato del sistema. È in questo senso probabilistico che assegniamo un valore descrittivo e predittivo all'affermazione: "il sistema fisico $\mathcal{S}$ si trova nello stato ξ". D'altra parte, non va dimenticato che, se consideriamo un singolo esperimento atto a misurare una certa osservabile A, esso fornirà un ben preciso risultato a (la posizione di un indicatore, un numero su un contatore digitale, il verificarsi o no di un "click" in un contatore Geiger, etc.). L'insieme di tutti i possibili risultati delle osservazioni di A forma il cosiddetto **spettro** di A e le distribuzioni di probabilità di cui sopra sono evidentemente concentrate sugli spettri delle osservabili.

In termini matematicamente precisi quanto appena detto si riassume nella seguente affermazione: se ξ è lo stato di $\mathcal{S}$, $\mathfrak{b}$ un arbitrario sottoinsieme di Borel della retta reale ed A un'arbitraria osservabile, allora $\mathrm{Pr}_A(\mathfrak{b}|\xi)$ è la probabilità che il risultato della misurazione di A appartenga a $\mathfrak{b}$. Come già detto, l'interpretazione fisica di questa affermazione è che, ripetendo N volte il medesimo esperimento atto a misurare A, empiricamente si osserva

$$\mathrm{Pr}_A(\mathfrak{b}|\xi) = \lim_{N\to\infty} \frac{N(\mathfrak{b})}{N} ,$$

dove $N(\mathfrak{b})$ rappresenta il numero di volte che si verifica un risultato appartenente al sottoinsieme $\mathfrak{b}$. In questo senso appare evidente che lo stato ξ non è altro che una conveniente abbreviazione per indicare l'insieme di tutte le condizioni rilevanti dell'esperimento. Ovviamente per le probabilità $\mathrm{Pr}_A(\mathfrak{b}|\xi)$ deve valere:

$$0 \le \mathrm{Pr}_A(\mathfrak{b}|\xi) \le 1 , \qquad \mathrm{Pr}_A(\varnothing|\xi) = 0 , \qquad \mathrm{Pr}_A(\mathbb{R}|\xi) = 1 \tag{7.1}$$

e, non appena due sottoinsiemi boreliani $\mathfrak{b}_1$ e $\mathfrak{b}_2$ sono disgiunti,

$$\mathrm{Pr}_A(\mathfrak{b}_1 \cup \mathfrak{b}_2|\xi) = \mathrm{Pr}_A(\mathfrak{b}_1|\xi) + \mathrm{Pr}_A(\mathfrak{b}_2|\xi) . \tag{7.2}$$

È convenzione diffusa introdurre una *densità di probabilità* $p_A(a|\xi)$, $a \in \mathbb{R}$ al posto della più precisa notazione in termini di sottoinsiemi boreliani, scrivendo

$$\mathrm{Pr}_A(\mathfrak{b}|\xi) = \int_{\mathfrak{b}} da\, p_A(a|\xi) .$$

In sostanza $p_A(a|\xi)\,da$ è la probabilità che il risultato dell'esperimento appartenga all'intervallo infinitesimo $(a, a + da)$. Come funzione di a, $p_A(a|\xi)$ va allora intesa in senso generalizzato, cioè come distribuzione. Ad esempio, se ogni ripetizione dell'esperimento dà sempre il medesimo risultato a_ξ, allora $p_A(a|\xi) = \delta(a - a_\xi)$, dove $\delta(x)$ è la delta di Dirac (vedi App. B.5).

Come è noto, una prima caratterizzazione empirica di queste distribuzioni di probabilità si ottiene calcolando, a partire dalla successione

$a^{(1)}, a^{(2)}, \ldots, a^{(N)}$ dei risultati sperimentali per l'osservabile A (con N che tende idealmente all'infinito), il **valor medio** o **valore di aspettazione** di A

$$\langle A \rangle = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} a^{(j)} = \int_{-\infty}^{+\infty} da\, a\, p_A(a)$$

e la **deviazione standard** o **dispersione** o **indeterminazione**

$$\begin{aligned} \Delta A &= \left[\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right]^{1/2} \\ &= \lim_{N\to\infty} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \left(a^{(j)} - \langle A \rangle \right)^2} \\ &= \left[\int_{-\infty}^{+\infty} da\, (a - \langle A \rangle)^2\, p_A(a) \right]^{1/2} , \end{aligned} \tag{7.3}$$

dove si è fatto uso della regola generale valida per un funzione $f(A)$

$$\langle f(A) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} da\, f(a)\, p_A(a) \, .$$

In queste ultime espressioni la dipendenza dallo stato ξ è sottintesa, cioè $\langle \cdot \rangle = \langle \cdot \rangle_\xi$ e $\Delta = \Delta_\xi$.

Un caso particolarmente rilevante si ottiene quando identicamente $\Delta A = 0$, cioè quando ogni ripetizione dell'esperimento dà il medesimo risultato a. Si dice allora che lo stato ξ del sistema è un **autostato** dell'osservabile A e a è il corrispondente **autovalore**. Questo fatto può verificarsi ovviamente solo se l'autovalore a in questione risulta essere, per ragioni di principio o per evidenza sperimentale, discreto, cioè separato dal resto dello spettro di A. Non si tratta comunque di una limitazione significativa, dato che, per via del potere risolutivo limitato degli apparati di misura, la descrizione operativa di una qualunque osservabile comporta che lo spettro sia sempre interamente discreto: in effetti A è approssimabile arbitrariamente bene in termini di opportune collezioni *finite* di osservabili **dicotomiche**, che assumono il valore 1 oppure 0 (e sono quindi discrete e limitate) e sono misurate mediante opportuni esperimenti di tipo "si o no" (tipicamente "si" $\to 1$ e "no" $\to 0$). Si pensi, ad esempio, alle misure di posizione mediante una collezione di rivelatori spazialmente ordinati, o agli esperimenti sul passaggio di fotoni attraverso filtri polarizzatori, etc.. Generalmente, le osservabili che sono oggetto degli esperimenti tipo "si o no" sono delle **funzioni caratteristiche** di altre osservabili: $E_A(b)$ è la funzione caratteristica dell'osservabile A che vale 1 non appena A assume un valore compreso nel sottoinsieme boreliano b e vale 0 altrimenti. Si noti che, per definizione stessa di funzione caratteristica, per un

qualunque stato ξ del sistema deve valere

$$\Pr_A(b|\,\xi) = \langle E_A(b)\rangle_\xi \ . \tag{7.4}$$

In definitiva le osservabili, nel senso operativo del termine, sono sempre dotate di spettro discreto (questo risulta evidente se pensiamo a come l'informazione sui risultati di un esperimento è memorizzata in un computer). Le osservabili "continue" rappresentano idealmente un processo di limite in cui la suddetta collezione di osservabili dicotomiche diventa infinita. Parimenti, l'informazione sperimentale richiesta diventa infinita, e quindi fisicamente inaccessibile. D'altro lato è chiaro che la discretizzazione di osservabili idealmente continue contiene un inevitabile fattore di arbitrarietà, che generalmente varia da una situazione sperimentale all'altra. Il suddetto processo di limite serve quindi allo scopo di uniformare la nozione matematica di osservabile, e risulta spesso indispensabile per definire in modo univoco e concettualmente economico i modelli teorici. Basti pensare alla grande semplicità, universalità ed eleganza dei principi di simmetria ed invarianza basati sui gruppi dei movimenti spazio-temporali (si veda al capitolo 9): la loro stessa formulazione richiede che certe osservabili, strettamente legate all'azione di tali gruppi sullo spazio degli stati, abbiano spettro continuo.

La meccanica classica, così come brevemente riassunta nella parte I, fornisce una precisa rappresentazione matematica per le osservabili e gli stati di un generico sistema fisico $\mathcal{S}$. Ad ogni $\mathcal{S}$ viene fatto corrispondere un opportuno *spazio delle fasi* $\mathcal{F}_\mathcal{S}$, $2n$-dimensionale, dove n è il numero dei *gradi di libertà* di $\mathcal{S}$. Le osservabili sono rappresentate dalle funzioni a volori reali su $\mathcal{F}_\mathcal{S}$, il quale è per definizione dotato di una struttura canonica, che consiste nell'assegnazione delle parentesi di Poisson per ogni coppia di osservabili (vedi §2.2), mentre gli stati sono identificati con le distribuzioni di probabilità su $\mathcal{F}_\mathcal{S}$, ovvero le funzioni positive-definite e normalizzate. Fra le osservabili, giocano un ruolo fondamentale le **coordinate canoniche**, ovvero le $\{q\}$ e le $\{p\}$, che tipicamente rappresentano le posizioni ed i momenti del sistema $\mathcal{S}$ e/o delle sue parti, ed in termini delle quali tutte le altre osservabili possono venir espresse. Esse sono evidentemente delle osservabili "fondamentali", nel senso indicato più sopra. Il formalismo della meccanica classica ci permette ora di evidenziarne una proprietà caratteristica: $(q_1,\ldots,q_n,p_1,\ldots.p_n)$ costituisce un **insieme irriducibile di osservabili**, nel senso che ogni funzione su $\mathcal{F}_\mathcal{S}$ che ha parentesi di Poisson nulle con tutte le $\{q\}$ e le $\{p\}$ è necessariamente una costante. Quindi tutte le osservabili non banali sono esprimibili come funzioni delle $\{q\}$ e delle $\{p\}$.

Dunque, secondo la meccanica classica, ad ogni osservabile A corrisponde una funzione a valori reali $A(q,p)$ (l'uso dello stesso simbolo

sottolinea il fatto che le osservabili sono di fatto *identificate* con le funzioni su $\mathcal{F}_{\mathcal{S}}$), mentre ad ogni stato ξ corrisponde una distribuzione di probabilità $\rho_\xi(q,p)$, che per definizione soddisfa a

$$\rho_\xi(q,p) \geq 0 \,, \qquad \int_{\mathcal{F}_{\mathcal{S}}} d^n q \, d^n p \; \rho_\xi(q,p) = 1 \,.$$

Infine il valor medio di A nello stato ξ si scrive

$$\langle A \rangle_\xi = \int_{\mathcal{F}_{\mathcal{S}}} d^n q \, d^n p \; \rho_\xi(q,p) A(q,p) \,,$$

mentre la probabilità $\Pr_A(b|\xi)$ segue dalla relazione generale (7.4) utilizzando la funzione caratteristica $E_A(b)$, che vale 1 su tutti i punti di $\mathcal{F}_{\mathcal{S}}$ sui quali A assume un valore appartenente a b e vale 0 altrimenti.

Nel caso di sistemi fisici "semplici", cioè dotati di un numero piccolo di osservabili fondamentali (poche coppie (q,p) secondo la meccanica classica), sembrerebbe ragionevole poter concepire ed effettuare (entro ovvi limiti tecnologici) un insieme completo di esperimenti atti a determinare il valore di tutte le osservabili con precisione grande a piacere. In altri termini, $\forall \epsilon > 0$, deve esistere uno stato sperimentale ξ tale che $\Delta A < \epsilon$ per qualunque osservabile A. Questo è il punto di vista implicito nella descrizione dei sistemi fisici basata sulla meccanica classica, per la quale gli stati con le suddette caratteristiche sono gli **stati puri** del sistema fisico $\mathcal{S}$. Nel limite ideale di precisione infinita gli stati puri sono delle distribuzioni di probabilità concentrate in un singolo punto dello spazio delle fasi e sono quindi in corrispondenza biunivoca con i punti di $\mathcal{F}_{\mathcal{S}}$. Risulta poi naturale estendere questa visione classica della natura anche a sistemi complessi, per i quali solo stati ξ non puri, detti anche **miscele statistiche** sono sperimentalmente accessibili. In ogni caso, pur ammettendo l'inevitabile incompletezza dell'informazione raccolta in uno stato ξ fisicamente realizzabile, il principio sottostante la visione classica del mondo è che ogni sistema fisico, per quanto complesso, ad ogni istante deve trovarsi in uno stato puro ben preciso, nel quale tutte le $\{q\}$ e le $\{p\}$ (e quindi tutte le osservabili), posseggono un ben preciso valore; solo la nostra ignoranza dei dettagli ci obbliga a introdurre il concetto di probabilità. Una conseguenza immediata di questa descrizione è che l'atto di "osservare" $\mathcal{S}$, ovvero fare su di esso esperimenti, lo perturba in modo trascurabile o comunque controllabile all'interno della stessa rappresentazione classica delle osservabili e degli stati.

D'altra parte, indipendentemente dalla modellizzazione matematica che possiamo assumere per descrivere il sistema $\mathcal{S}$, esiste un concetto strettamente operativo di stato puro: $\mathcal{S}$ si troverà in uno stato puro tutte le volte che l'informazione raccolta in esso è massimale, ovvero quando

non risulta possibile determinare sperimentalmente il valore di una ulteriore osservabile del sistema senza necessariamente perdere il controllo sul valore di una o più delle osservabili precedentemente misurate. L'assunzione fondamentale della meccanica classica, suggerita dall'evidenza sperimentale del modo macroscopico "ordinario", è che il processo di raffinamento dello stato di $\mathcal{S}$, mediante la misurazione sempre più precisa di un numero sempre maggiore di osservabili, si possa portare avanti, almeno in linea di principio, fino alla determinazione dei valori assunti da tutte le osservabili del sistema. Lo stato viene così ridotto ad uno stato puro della meccanica classica, cioè ad un intorno piccolo a piacere di un singolo punto di $\mathcal{F}_{\mathcal{S}}$.

Abbiamo visto nei capitoli precedenti come l'evidenza sperimentale su scale microscopiche sia in netto contrasto con questa visione classica. Le relazioni di indeterminazione tra momento e posizione implicano che è impossibile, per ragioni di principio, determinare con una certa precisione la posizione di un elettrone senza al contempo perdere informazione sul momento, o viceversa. Più in generale, l'interazione tra $\mathcal{S}$ e l'apparato di misura perturba il sistema stesso in un modo non completamente controllabile, per cui la misurazione di una data osservabile, oltre a causare l'indeterminazione di altre osservabili, può fornire dei valori che non sono attribuibili al solo sistema e/o non sono in alcuna relazione con i valori della medesima osservabile subito dopo la misurazione. Dunque è un fatto sperimentalmente accertato che esistono sistemi fisici per i quali il processo di raffinamento dello stato si deve ritenere concluso ed il livello di stato puro raggiunto, per ragioni di principio, ben prima che i valori di tutte le osservabili risultino determinati.

A questo punto risulta opportuno fare una distinzione di fondo tra due diversi tipi di osservazione, che chiameremo di prima e seconda specie, rispettivamente, ed introdurre i concetti operativi di osservabili compatibili e di preparazione completa degli stati del sistema fisico $\mathcal{S}$[2].

In un *esperimento di prima specie*, o **preparazione**, si intende misurare, con la maggior accuratezza praticamente possibile, una o più osservabili del sistema $\mathcal{S}$, con la ragionevole certezza che gli stessi valori verrebbero osservati in una ripetizione immediata della misura stessa (mediante il medesimo apparato sperimentale od un altro ad esso equivalente). Possiamo allora affermare che $\mathcal{S}$ viene *preparato* così in uno stato caratterizzato dai quei precisi valori delle osservabili in questione. Viceversa, in un *esperimento di seconda specie*, una o più osservabili vengono misurate mediante operazioni che necessariamente comportano la perdita parziale o totale

[2] Quello che segue è soltanto un brevissimo acconto di una trattazione generale degli stati e delle osservabili basata su concetti puramente operativi. Versioni più complete e rigorose si trovano in [**Jau68, Lud83**]

dell'informazione sul valore assunto dalle stesse osservabili, subito dopo il completamento dell'osservazione.

Consideriamo un semplice esempio. Una sorgente radioattiva emette particelle α di energia definita. Il momento di una data particella, e quindi la sua energia, viene determinato osservando la parte iniziale della traccia lasciata in una camera a bolle, in presenza di un campo magnetico costante. La particella poi, rilasciando gradualmente la sua energia cinetica al fluido della camera, finisce per essere assorbita dallo stesso. In tal caso, scomparsa ogni traccia relativa all'osservabile direttamente misurata, l'osservabile *posizione della particella*, possiamo affermare che il sistema $\mathcal{S}$ viene alla fine distrutto. È evidente che l'osservazione appena descritta costituisce un esperimento di seconda specie, almeno per quanto riguarda il sistema fisico $\mathcal{S}$ costituito da una fissata particella α. Supponiamo ora di disporre di opportuni apparati di focalizzazione nelle vicinanze della sorgente, per produrre un fascio ben collimato di particelle. Essendo nota l'energia dalla precedente esperienza con la camera a bolle, ciascuna particella del fascio si trova preparata in uno stato di momento ben definito (più correttamente, in uno stato in cui è noto il valor medio $\langle p_j \rangle$ di ciascuna componente del momento e la dispersione relativa $\Delta p_j / \langle p_j \rangle$ è molto piccola e comunque ulteriormente riducibile, in linea di principio, operando opportunamente sulle condizioni sperimentali). Abbiamo così ottenuto una preparazione. Si noti che non si tratta di una conclusione desunta da un singolo esperimento compiuto su una singola copia del sistema $\mathcal{S}$. Infatti, abbiamo dovuto fare tacitamente ricorso ad ipotesi fondamentali come l'identità tra le successive particelle α, e l'invarianza del processo di decadimento dal modo di osservazione dello stesso. Questa è la situazione usuale, più che una eccezione: nel processo di preparazione di un determinato stato interviene generalmente un complesso di principi generali, esperienze sperimentali, nozioni teoriche (e regole di buon senso).

Consideriamo un secondo esempio: un'onda elettromagnetica (quasi) monocromatica viaggia lungo una sottile guida d'onda (ad esempio una fibra ottica, per frequenze di un opportuno intervallo). Ciascun fotone costituente della radiazione possiede un ben definito momento nella direzione (diciamo z) della guida, ed è anche ben localizzato, come posizione, nelle due direzioni trasverse. Risulta dunque preparato in uno stato caratterizzato da ben definiti valori di x, y e p_z. Inoltre, interponendo opportunamente nella guida un polarizzatore lineare orientato lungo l'asse x, si otterranno fotoni superstiti dotati di ben definiti valori di x, y e p_z e della polarizzazione s_x lungo l'asse x (in particolare $s_x = 1$). Sappiamo dall'esperienza che non è possibile misurare un'ulteriore osservabile, ad esempio la componente z della posizione, senza perturbare in

modo definitivo il sistema stesso, perdendo la monocromaticità od addirittura distruggendo i fotoni rivelati all'altezza z mediante un'opportuna lastra semitrasparente e fotosensibile. Un fotone con ben definiti valori di x, y, p_z e s_x è dunque *completamente preparato*. Le caratteristiche salienti dell'insieme di osservabili $\{x, y, p_z, s_x\}$ sono due: esse sono tutte mutuamente *compatibili* (vedi sotto) e non esiste alcuna altra osservabile compatibile con esse che non sia da esse dipendente (cioè univocamente fissata in valore non appena le altre lo sono).

7.1.1. Insiemi completi di osservabili compatibili (I). In generale, due osservabili A e B di un generico sistema fisico $\mathcal{S}$ si dicono **compatibili** qualora la misurazione di prima specie di A non comporti necessariamente alcun aumento dell'indeterminazione sul valore assunto da B, e viceversa. Possiamo dire che ΔA e ΔB risultano statisticamente scorrelati nella ripetizione di tante serie di esperimenti identici. Questo concetto di compatibilità è puramente operativo: esso fa riferimento a precise apparecchiature sperimentali. Di fatto, sono le stesse apparecchiature, atte per ipotesi alla misurazione di A e B, ad essere, o non essere, compatibili. La determinazione della polarizzazione lineare di un fotone non ostacola in alcun modo la misurazione del momento del fotone stesso, e viceversa. Naturalmente le due osservabili A e B possono essere compatibili in modo banale, cioè semplicemente perché tra loro *dipendenti* (vale a dire una funzione dell'altra). In questo caso esse possono venir misurate in un unico esperimento mediante lo stesso apparato sperimentale, per cui nessun problema di incompatibilità può manifestarsi. Il caso non banale è quando A e B sono compatibili pur essendo *indipendenti*, e questo è quanto qui assumiamo. Si noti inoltre che i concetti di compatibilità e indipendenza ci permettono di precisare la nozione di osservabili "fondamentali", fissandone delle caratteristiche salienti: le osservabili fondamentali sono tutte tra loro indipendenti e formano un **insieme irriducibile di osservabili**, nel senso che ogni altra osservabile compatibile con ognuna di esse è necessariamente un'osservabile banale, che assume cioè lo stesso valore indipendentemente dallo stato del sistema.

Supponiamo ora che esista un'altra osservabile C di $\mathcal{S}$, indipendente da A e B, e compatibile con entrambe (A e B sono per ipotesi indipendenti e compatibili tra loro[3]). Per misurare anche C assieme ad A e B sarà necessario complicare ulteriormente l'apparato sperimentale. E così pure nel caso che si voglia misurare un'eventuale altra osservabile D, compatibile con le tre precedenti e da esse indipendente. Questo processo

[3] Si osservi che la compatibilità ci permette di dare un significato operativo preciso alla nozione di un'osservabile dipendente, cioè funzione di varie altre osservabili: se A e B sono compatibili, la relazione funzionale $C = f(A, B)$ è suscettibile di verifica sperimentale.

di accrescimento del complesso delle apparecchiature sperimentali ha necessariamente un termine: secondo la meccanica classica il limite è unico e fissato dall'insieme delle osservabili fondamentali, le $\{q\}$ e $\{p\}$; secondo l'esperienza attuale esso dipende invece dalle osservabili sotto esame e viene raggiunto non appena l'insieme delle osservabili compatibili risulta **completo**, nel senso che non risulta possibile individuare altre osservabili compatibili con le precedenti e da esse indipendenti. In altri termini, l'insieme di osservabili compatibili è completo se un qualunque esperimento di prima specie, atto a misurare un'ulteriore osservabile indipendente, comporta per necessità un aumento dell'indeterminazione sul valore assunto da una o più delle osservabili originarie. Si noti che questa definizione operativa di completezza non è assoluta: nuovi risultati sperimentali possono sempre richiedere l'introduzione di nuove osservabili compatibili con le precedenti.

Dunque una **preparazione completa** corrisponde alla misurazione di prima specie di un **insieme completo di osservabili compatibili**, e costituisce il raggiungimento del massimo dell'informazione possibile sul sistema $\mathcal{S}$. In altre parole, una preparazione completa lascia il sistema in uno stato puro. Quindi, ad ogni insieme completo di osservabili compatibili $\{A, B, C, \ldots\}$ risulta associato un sottoinsieme di stati puri biunivocamente individuati dai valori distinti assunti dalle osservabili $A, B, C, \ldots$. Viceversa, per ogni stato puro ξ esiste almeno un insieme completo di osservabili compatibili che assumono quei precisi valori se e solo se il sistema si trova nello stato ξ. La novità essenziale rispetto alla visione classica consiste nel fatto che in natura esistono osservabili incompatibili, e, di conseguenza, esistono molteplici insiemi completi, tra loro incompatibili, di osservabili compatibili. A ciascuno di questi insiemi corrisponde un particolare sottoinsieme di stati puri nei quali certe osservabili di altri insiemi necessariamente non posseggono valori definiti. È l'unione di tutti questi sottoinsiemi che costituisce lo spazio degli stati puri destinato a sostituire lo spazio delle fasi $\mathcal{F}_{\mathcal{S}}$ di classica memoria.

Ricordiamo infine che, essendo le osservabili sempre discrete, almeno dal punto di vista operativo su cui si basa evidentemente il concetto di preparazione del sistema fisico $\mathcal{S}$, l'insieme degli stati puri ottenibili come preparazioni misurando un fissato insieme completo di osservabili compatibili, è necessariamente *numerabile*. Tale numero può, in linea di principio, essere infinito, anche se ovviamente solo una frazione finita è fisicamente realizzabile.

Fin qui la trattazione è stata del tutto generale e, come tale, puramente descrittiva. Per costruire una teoria, occorre stabilire una precisa rappresentazione matematica per stati, stati puri ed osservabili, nonché regole che permettano di *calcolare* i possibili risultati degli esperimenti

e le relative frequenze, ovvero di fare delle previsioni quantitative sul sistema fisico in esame. Nei prossimi paragrafi vedremo come, alla luce del fondamentale **principio di sovrapposizione lineare** la meccanica quantistica fornisca una risposta incredibilmente efficace ed esauriente a questa domanda pratica[4].

7.2. Il principio di sovrapposizione lineare

Nella formulazione standard della meccanica quantistica, il primo passo consiste nella caratterizzazione matematica dello spazio degli stati puri. Si tratta in sostanza di astrarre una definizione generale, consistente con la discussione generale appena fatta, a partire dagli esempi ampiamente descritti nel capitolo precedente.

Conviene qui richiamare gli aspetti salienti della descrizione quantomeccanica di due classi particolari di fenomeni, connessi rispettivamente agli stati di polarizzazione dei fotoni ed al comportamento ondulatorio della materia (si ricordino ad esempio gli esperimenti sulla diffrazione ed interferenza degli elettroni). In entrambi i casi la descrizione matematica si basa sul concetto di **vettore di stato**, sia esso il vettore di polarizzazione $\boldsymbol{\varepsilon}$ di un fotone o la funzione d'onda $\psi(\mathbf{x})$ di un elettrone. Questi sono elementi di uno spazio lineare, cioè possono essere linearmente sovrapposti, ottenendo ancora un vettore di stato. Inoltre essi sono *normalizzabili*, il che ovviamente richiede che sullo spazio lineare in questione sia definita una *norma*.

La possibilità di sovrapporre linearmente due vettori di stato, *con coefficienti generalmente complessi*, è di fondamentale importanza e di fatto caratterizza i fenomeni prettamente quantomeccanici, a causa degli effetti di interferenza. L'affermazione che tale sovrapposizione è sempre possibile costituisce il **principio di sovrapposizione lineare** e risulta strettamente connessa all'interpretazione probabilistica di oggetti non direttamente osservabili come i vettori di polarizzazione e le funzioni d'onda: se $\boldsymbol{\varepsilon}_1$ e $\boldsymbol{\varepsilon}_2$ sono due vettori di polarizzazione ortonormali corrispondenti a due orientazioni ortogonali di un polarizzatore, allora è sufficiente ruotare il polarizzatore di un angolo θ, per preparare fotoni polarizzati nella direzione intermedia $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_1 \cos\theta + \boldsymbol{\varepsilon}_2 \sin\theta$ (con probababilità $\cos^2\theta$ o $\sin^2\theta$ a partire da fotoni rispettivamente polarizzati lungo $\boldsymbol{\varepsilon}_1$ o $\boldsymbol{\varepsilon}_2$). Analogamente, se $\psi_1(\mathbf{x})$ e $\psi_2(\mathbf{x})$ rappresentano le funzioni d'onda di un elettrone localizzato rispettivamente nelle due regioni disgiunte V_1 e V_2, allora $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ descrive uno stato nel quale lo stesso elettrone può

[4] D'altro canto, la meccanica quantistica introduce concetti astratti così lontani dall'esperienza comune, senza al contempo rispondere ad alcune domande di principio, da lasciare molti insoddisfatti, come dimostrano i settant'anni di tentativi (evidentemente tutti falliti) per un superamento della stessa.

venir osservato sia in V_1 (con probabilità $|c_1|^2$) che in V_2 (con probabilità $|c_2|^2 = 1 - |c_1|^2$). È a questo punto che risulta necessario dotare di un opportuno prodotto scalare lo spazio lineare dei vettori di stato, allo scopo di caratterizzare come tra loro *ortogonali* i vettori corrispondenti alle situazioni alternative appena descritte. Si tratta di fornire una rappresentazione matematica per l'osservazione empirica, che è anche esigenza logica, secondo la quale un fotone polarizzato lungo ε_1 non passa mai attraverso un polarizzatore orientato lungo ε_2 oppure un singolo elettrone non viene localizzato simultaneamente in V_1 e in V_2.

Va tuttavia sottolineato che gli esempi appena citati non implicano di per se stessi il principio di sovrapposizione lineare, né tantomeno la natura complessa dei coefficienti (in effetti, nel caso particolare dei vettori di polarizzazione, è sembrato naturale considerare una combinazione lineare con coefficienti reali). Dato che l'interpretazione probabilistica richiede, nella verifica sperimentale, di considerare grandi insiemi statistici di copie identiche del sistema in esame (ovvero ripetizioni numerose del medesimo esperimento), le due situazioni di cui sopra risultano spiegabili in termini di statistica puramente classica, senza necessità di combinare linearmente dei vettori di stato. Ciò è dovuto proprio alla caratteristica di ortogonalità dei due vettori di polarizzazione ε_1 e ε_2 e al fatto che le due funzioni d'onda ψ_1 e ψ_2 hanno supporto disgiunto, $V_1 \cap V_2 = \varnothing$.

Ma due vettori di polarizzazione possono non essere ortogonali (ad esempio ε e ε_1). Quindi, mediante opportuni esperimenti di separazione e ricombinazione di fasci di luce (vedi ad esempio l'App. A.3), possiamo ottenere dei fotoni il cui stato di polarizzazione è descritto dal vettore

$$\varepsilon' = \alpha\varepsilon + \beta\varepsilon_1 = (\alpha\cos\theta + \beta)\varepsilon_1 + \alpha\sin\theta\varepsilon_2 ,$$

dove α e β sono numeri complessi. Questi fotoni attraverseranno il polarizzatore corrispondente a ε_1 con una probabilità $|\alpha\cos\theta + \beta|^2$ che dipende dalla fase relativa di α e β. Come sappiamo, questa dipendenza rappresenta la spiegazione quantomeccanica dei ben noti fenomeni di interferenza della radiazione luminosa.

Analogamente, è perfettamente possibile che, durante l'evoluzione temporale, le due funzioni d'onda ψ_1 e ψ_2 sviluppino una sovrapposizione non nulla, pur restando tra loro ortogonali. Allora lo stato descritto dalla combinazione lineare $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ dà luogo ai ben noti fenomeni di interferenza, assolutamente inspiegabili in termini di statistica classica e dove la natura complessa di c_1 e c_2 gioca un ruolo fondamentale. La densità di probabilità di trovare l'elettrone nel punto x vale

$$|\psi(x)|^2 = |c_1|^2|\psi_1(x)|^2 + |c_2|^2|\psi_2(x)|^2 + 2\mathfrak{Re}\,\bar{c}_1 c_2 \overline{\psi_1(x)}\psi_2(x)$$

e dipende dalla fase relativa tra $c_1\psi_1$ e $c_2\psi_2$ se e solo se c'è sovrapposizione: $\overline{\psi_1(\mathbf{x})}\psi_2(\mathbf{x}) \neq 0$. Nel caso contrario in cui i supporti di ψ_1 e ψ_2 restino disgiunti, non è fisicamente possibile distinguere una collezione di N elettroni ($N \to \infty$), tutti con funzione $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, da un'altra in cui $N|c_1|^2$ elettroni sono descritti da ψ_1 e $N|c_2|^2$ da ψ_2.

Da quanto finora visto, risulta evidente che la fase globale della funzione d'onda, o del vettore di polarizzazione, non descrive alcuna proprietà osservabile. Non sono quindi i vettori di stato, anche una volta normalizzati, a trovarsi in corrispondenza biunivoca con gli stati puri del sistema fisico $\mathcal{S}$, ma le classi di equivalenza dei vettori normalizzati che differiscono solo per un fattore di fase. Queste classi costituiscono i cosiddetti **raggi** dello spazio vettoriale in questione. In pratica, un raggio si ottiene identificando tutti i vettori che differiscono per un arbitrario fattore complesso (non nullo) di moltiplicazione: il modulo di questo fattore viene fissato imponendo la corretta normalizzazione, mentre la fase resta comunque libera ed inosservabile. Un raggio coincide quindi con un sottospazio monodimensionale dello spazio vettoriale $\mathcal{V}$ in questione, e l'insieme di tutti i raggi di $\mathcal{V}$ costituisce lo **spazio proiettivo** $\mathcal{P} = \mathcal{V}/\mathbb{C}^*$, dove $\mathbb{C}^*$ è il gruppo dei numeri complessi diversi da zero (avendo inteso $\mathcal{V}$ definito sul campo dei numeri complessi $\mathbb{C}$).

I vettori di polarizzazione di un fotone formano uno spazio isomorfo allo spazio lineare bidimensionale $\mathbb{C}^2$, con prodotto scalare $(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}') = \overline{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}'$. $\mathbb{C}^2$ è un esempio elementare di **spazio di Hilbert** [**BRS93**]. Le funzioni d'onda di un elettrone, soggette alla sola condizione di normalizzabilità

$$\int d^3x\, |\psi(\mathbf{x})|^2 < \infty$$

(con l'integrazione nel senso di Lebesgue), formano anch'esse uno spazio di Hilbert, usualmente denotato $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)$, con prodotto scalare

$$(\phi, \psi) = \int d^3x\, \overline{\phi(\mathbf{x})}\psi(\mathbf{x})\,.$$

$\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)$ è uno spazio lineare di dimensione infinita ed è *completo* (nel senso che contiene i vettori limite di ogni successione di Cauchy), come richiesto dall'applicazione incondizionata del principio di sovrapposizione lineare. In sostanza, esso è lo spazio di Hilbert più piccolo contenente le funzioni d'onda di singola particella così come introdotte nel cap. 5.

Nel caso del generico sistema fisico $\mathcal{S}$, lo spazio di Hilbert dei vettori di stato viene identificato operativamente a partire da un fissato insieme completo di osservabili compatibili. A ciascuna preparazione distinta ottenuta misurando tali osservabili in esperimenti di prima specie, corrisponde uno stato puro di $\mathcal{S}$, al quale viene associato un raggio di uno spazio vettoriale complesso $\mathcal{H}_\mathcal{S}$. $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ viene dotato di prodotto scalare tramite la

regola che vettori di raggi corrispondenti a preparazioni distinte sono ortogonali. In assenza di restrizioni sperimentalmente fondate, il principio di sovrapposizione lineare va applicato in modo incondizionato, affermando che qualunque combinazione lineare di vettori (idealmente anche infinita, purché le somme parziali definiscano una successione di Cauchy) appartiene a $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. Questo significa che tale combinazione è anch'essa un vettore di stato, cioè appartiene ad un raggio di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ che corrisponde ad uno stato puro fisicamente preparabile mediante opportuni esperimenti di prima specie. $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ risulta perciò completo ed è uno spazio di Hilbert. Si ricordi che la richiesta di preparabilità per uno stato puro, almeno in linea di principio, è implicita nella sua definizione stessa, che è operativa: essa equivale a richiedere che per ogni stato puro esiste almeno un insieme completo di osservabili compatibili che hanno quello stato come autostato.

Siamo finalmente in posizione per formulare il postulato I della meccanica quantistica, cioè quello che specifica dal punto di vista matematico la natura dello spazio degli stati puri di un generico sistema fisico $\mathcal{S}$:

Postulato I

Gli stati puri di un sistema fisico $\mathcal{S}$ sono in corrispondenza biunivoca con i raggi di uno spazio di Hilbert, $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, complesso e separabile. Lo spazio degli stati puri è quindi identificabile con $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}/\mathbb{C}^*$.

In base alle considerazioni fatte finora, la richiesta di **separabilità** per $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ si spiega come segue. Uno spazio di Hilbert è separabile se e solo se ammette una base numerabile [**BRS93**] (quindi uno spazio di Hilbert finito-dimensionale, come $\mathbb{C}^2$, è banalmente separabile). D'altra parte, i raggi corrispondenti ai diversi stati puri ottenuti come preparazioni basate su un fissato insieme completo di osservabili compatibili sono per ipotesi ortogonali in $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. Se teniamo quindi conto che tali preparazioni sono numerabili (vedi la discussione al §7.1), numerabili devono anche essere i raggi ortogonali di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, che è perciò separabile. Uno spazio di Hilbert non separabile contiene degli insiemi non numerabili di vettori ortogonali, i quali descrivono stati puri che non possono essere risolti, cioè distinti gli uni dagli altri, con preparazioni finite (cioè che coinvolgono un numero finito di operazioni), dato che le preparazioni finite sono numerabili. Dunque un $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ non separabile non è sperimentalmente ricostruibile e non può far parte di una descrizione oggettiva del sistema fisico $\mathcal{S}$.

In sostanza, richiedere la separabilità di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ è equivalente a dichiarare l'impossibilità fisica di fissare esattamente il valore di osservabili presumibilmente dotate di spettro continuo. La procedura ideale di limite di

infinita precisione (ottenibile determinando i valori assunti da una collezione infinita di funzioni caratteristiche relative all'osservabile continua in questione) deve portare a stati puri fisicamente non realizzabili e quindi non rappresentabili all'interno di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. In caso contrario l'insieme degli stati puri così preparati, che è manifestamente non numerabile, richiederebbe per la sua descrizione un insieme non numerabile di vettori di stato ortogonali, cioè un $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ non separabile. Tuttavia l'inclusione nel formalismo della meccanica quantistica di certi autovettori di osservabili continue (i quali non appartengono veramente allo spazio di Hilbert degli stati fisici) offre, come presto vedremo, indiscutibili vantaggi dal punto di vista delle applicazioni pratiche ed è ormai d'uso comune. L'importante è non dimenticare che tali vettori non corrispondono a stati fisicamente realizzabili.

A questo punto conviene anche uniformare la notazione, ricordando i cosiddetti **ket** e **bra** di Dirac [**Dir59**] già introdotti al cap. 5. Denoteremo quindi con $|\psi\rangle$ un generico vettore, o *ket*, di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. La scelta della lettera ψ ricorda la funzione d'onda della meccanica ondulatoria, ma possiede qui un valore puramente simbolico: un altro vettore di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ sarà indicato con $|\psi'\rangle$ o $|\phi\rangle$ o $|xyz..\rangle$, purché all'interno di $|\ \rangle$ sia contenuto un simbolo diverso. Il prodotto scalare tra due vettori $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ si scrive $\langle\psi|\phi\rangle$ e gode delle ben note proprietà

$$\langle\psi|c_1\phi_1 + c_2\phi_2\rangle = c_1\,\langle\psi|\phi_1\rangle + c_2\,\langle\psi|\phi_2\rangle\ ,$$

dove c_1 e c_2 sono arbitrari numeri complessi, e

$$\langle\phi|\psi\rangle = \overline{\langle\psi|\phi\rangle}\ .$$

La norma di $|\psi\rangle$ vale quindi

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}\ .$$

Ad ogni *ket* $|\psi\rangle$ è associato un vettore duale, o **bra** $\langle\psi|$, che agisce come funzionale lineare continuo su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ attraverso il prodotto scalare:

$$\langle\psi| : \mathcal{H}_{\mathcal{S}} \longrightarrow \mathbb{R}\ , \quad \langle\psi| : |\phi\rangle \longmapsto \langle\psi|\phi\rangle\ ,\ \forall\,|\phi\rangle \in \mathcal{H}_{\mathcal{S}}\ .$$

L'applicazione antilineare $|\psi\rangle \mapsto \langle\psi|$ esiste ben definita grazie al teorema di Riesz [**BRS93**]. Il formalismo dei *bra* e dei *ket* sarà esteso anche ai vettori di stato idealizzati che, corrispondendo ad un valore esatto di osservabili continue, si trovano al di fuori di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$.

PROBLEMA 7.2-1 []Si verifichi che i raggi di uno spazio di Hilbert bidimensionale, quale quello dei vettori di polarizzazione di un fotone, sono in corrispondenza uno-a-uno con i punti della sfera S^2.

SOLUZIONE *[]Data una base* $|1\rangle$ *e* $|2\rangle$ *di vettori linearmente indipendenti, per definizione ogni altro vettore* $|\psi\rangle$ *si può scrivere*

$$|\psi\rangle = z_1\,|1\rangle + z_2\,|2\rangle \ ,$$

con z_1 *e* z_2 *numeri complessi. Se* $z_1 \neq 0$*, allora* $|\psi\rangle$ *e*

$$|\psi_1\rangle = |1\rangle + z\,|2\rangle \ , \quad z = \frac{z_2}{z_1}$$

appartengono ad un unico raggio, univocamente identificato dal numero complesso z*. Per coprire anche il caso* $z_1 = 0$*, assumiamo* $z_2 \neq 0$ *(il caso in cui sia* z_1 *che* z_2 *si annullano corrisponde al vettore nullo e va escluso) e considerariamo il vettore*

$$|\psi_2\rangle = w\,|1\rangle + |2\rangle \ , \quad w = \frac{z_1}{z_2} \ .$$

Evidentemente $|\psi\rangle = z_2\,|\psi_2\rangle$*, per cui* $|\psi_2\rangle$ *appartiene allo stesso raggio di* $|\psi\rangle$*. Se* $w \neq 0$*, allora* $|\psi\rangle$*,* $|\psi_1\rangle$ *e* $|\psi_2\rangle$ *stanno tutti e tre nello stesso raggio, univocamente identificato da* $w = z^{-1}$*. Dunque lo spazio dei raggi coincide con il piano complesso proiettivo, la cosiddetta "sfera di Riemann", che viene usualmente denotato con* CP^1 *(*1*-dimensional Complex Projective space). La relazione con la sfera* S^2*, identificata con il luogo dei punti in* $\mathbb{R}^3$ *equidistanti dall'origine (*$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$*), si ottiene attraverso le proiezioni stereografiche, ad esempio quella dal polo nord* $(0,0,1)$

$$(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{1+|z|^2}\,(2\,\mathfrak{Re}\,z,\ 2\,\mathfrak{Im}\,z,\ 1-|z|^2) \ .$$

7.2.1. Sistemi composti. Due distinti sistemi fisici $\mathcal{S}$ e $\mathcal{S}'$ possono essere combinati insieme per formare un nuovo sistema fisico più complesso, che denoteremo con $\mathcal{S} \cup \mathcal{S}'$. Questa notazione sottolinea il fatto che si tratta innanzitutto di una operazione logica, analoga all'unione di due insiemi astratti. Dal punto di vista delle osservabili, il *sistema composto* $\mathcal{S} \cup \mathcal{S}'$ è univocamente caratterizzato nel seguente modo: ogni osservabile A di $\mathcal{S}$ è un'osservabile anche di $\mathcal{S} \cup \mathcal{S}'$ e lo stesso vale per ogni osservabile A' di $\mathcal{S}'$; inoltre, come osservabili del sistema composto, A e A' sono compatibili. In particolare, la semplice unione di due insiemi completi di osservabili compatibili per $\mathcal{S}$ e $\mathcal{S}'$ fornisce un insieme completo di osservabili compatibili per $\mathcal{S} \cup \mathcal{S}'$. Quindi, secondo quanto detto al §7.2, una collezione completa di stati puri di $\mathcal{S} \cup \mathcal{S}'$ si ottiene facendo il prodotto cartesiano di analoghe collezioni di stati puri di $\mathcal{S}$ e $\mathcal{S}'$. In termini di vettori di stato questo si traduce nell'affermazione che se $\{|\psi_n\rangle, n = 1,2,\ldots\}$ e $\{|\psi'_n\rangle, n = 1,2,\ldots\}$ sono due basi ortonormali rispettivamente di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ e $\mathcal{H}_{\mathcal{S}'}$, allora $\{|\psi_m\rangle\,|\psi'_n\rangle, m,n = 1,2,\ldots\}$ è una base dello spazio di Hilbert complessivo $\mathcal{H}_{\mathcal{S}\cup\mathcal{S}'}$. Infine, assumendo di poter applicare incondizionatamente il principio di sovrapposizione lineare, un generico vettore di stato fisicamente preparabile del sistema composto

si scrive come combinazione lineare della suddetta base

$$|\Psi\rangle = \sum_{mn} \Psi_{mn} |\psi_m\rangle |\psi'_n\rangle \ .$$

Lo spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}\cup\mathcal{S}'}$ così ricostruito coincide perciò con il **prodotto tensoriale** $\mathcal{H}_{\mathcal{S}} \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{S}'}$ dei due spazi iniziali.

L'operazione di composizione di due sistemi fisici può essere ripetuta più volte, risultando in sistemi molto complessi a partire da sistemi "semplici", cioè dotati di poche osservabili fondamentali. Viceversa, dato un sistema fisico più o meno complesso, ma comunque caratterizzato da una certa individualità, risulta naturale cercare di "decomporlo" in sistemi più semplici, facilitando così enormemente la determinazione di opportuni insiemi completi di osservabili compatibili, ovvero la ricostruzione del corretto spazio di Hilbert degli stati puri. La fisica "fondamentale" si occupa proprio del problema di ridurre ogni sistema fisico alle sue componenti più semplici possibili: dai sistemi macroscopici alle molecole, quindi agli atomi, poi alle particelle atomiche, a quelle nucleari e infine a quelle subnucleari, in una rincorsa che al giorno d'oggi sembra essersi conclusa nel cosiddetto *modello standard*, almeno per quanto riguarda i riscontri sperimentali. È tuttavia curioso notare come, lungo questa strada "riduzionista", la necessità di integrare nella meccanica quantistica i principi della relatività ristretta di Einstein abbia determinato una crisi proprio della visione "a particelle" (anche se soggette alla meccanica ondulatoria) della materia, a favore di una visione unificata in termini di campi quantizzati sia per la materia che per la radiazione. Da questo punto di vista il processo riduzionista finisce per non ridurre affatto, dato che un campo (quantizzato e non) possiede comunque un numero enorme (praticamente infinito) di gradi di libertà e di conseguenza un numero enorme di osservabili fondamentali. Queste considerazioni ci portano tuttavia ben al di là dello scopo di questo libro, per cui non le approfondiremo ulteriormente. D'altra parte, all'interno della fisica non relativistica risulta quasi sempre sufficiente l'approccio riduzionista più diretto, in base al quale il generico sistema fisico $\mathcal{S}$ è composto da sistemi elementari, genericamente chiamati particelle, per i quali osservabili fondamentali sono il momento, la posizione e al più poche altre osservabili discrete e limitate, quali lo **spin** e l'**isospin** (si veda ai capp. 8 e 9). Di conseguenza lo spazio di Hilbert di una singola particella è isomorfo a $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)$ o al massimo a $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^n$, con n numero intero piuttosto piccolo, per cui $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ risulta isomorfo al prodotto tensoriale di varie copie di $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)$ e di uno spazio di Hilbert finito-dimensionale.

7.3. Osservabili ed esperimenti in meccanica quantistica

Consideriamo un esperimento di prima specie, atto a misurare una certa osservabile A. Onde evitare ulteriori complicazioni, assumiamo che A sia una osservabile discreta, ovvero tale che il suo spettro di possibili valori sperimentali sia discreto. La discretizzazione di alcune osservabili fondamentali, dotate classicamente di spettro continuo, è proprio una caratteristica saliente dei fenomeni microscopici che hanno imposto la transizione alla meccanica quantistica. Come sappiamo, la nostra scelta non comporta comunque alcuna reale perdita di generalità: se inizialmente prendiamo in esame una osservabile continua, o presunta tale, come la componente x della posizione di una particella, possiamo identificare l'osservabile discreta A nella funzione caratteristica $E_x(\mathfrak{b})$, che vale 1 se x appartiene al sottoinsieme boreliano $\mathfrak{b} \subset \mathbb{R}$ e 0 altrimenti. La grandezza x può quindi essere approssimata dalla collezione di osservabili dicotomiche $\{A_j = E_x(\mathfrak{b}_j)\}$, dove i sottoinsiemi $\mathfrak{b}_j$, la cui unione ricopre $\mathbb{R}$, sono tutti disgiunti. Va sempre ricordato che tali collezioni di funzioni caratteristiche corrispondono più accuratamente agli effettivi apparati sperimentali con cui si intendono misurare osservabili continue.

Si supponga inoltre che il sistema $\mathcal{S}$ si trovi in uno stato tale che il risultato dell'esperimento possa essere predetto con certezza: l'osservabile A assume senz'altro il valore sperimentale a, ovvero $\Delta A = 0$. (Ad esempio, supponiamo che, in base all'evidenza sperimentrale pregressa, un certo oggetto $\mathcal{O}$ si trovi senz'altro all'interno di una determinata regione $\mathcal{R}$ dello spazio. Questo significa che l'esperimento di tipo "si o no" denominato "rivelazione di $\mathcal{O}$ nella regione $\mathcal{R}$" fornisce sempre "si" come risultato, assegnando perciò il valore 1 all'opportuna funzione caratteristica.) Come già anticipato al §7.1, in questo caso si dice che il sistema si trova nell'autostato dell'osservabile A corrispondente all'autovalore a. Analogamente, un vettore di stato che decrive un autostato di A si dice **autovettore** di A. In generale molteplici autostati corrispondono al medesimo autovalore. Per esempio, nel caso in cui $A = E_x(\mathfrak{b})$, esistono infinite funzioni d'onda ortonormali con supporto contenuto in $\mathfrak{b}$ (autovalore 1) o con supporto disgiunto da $\mathfrak{b}$ (autovalore 0). Esistono molti altri esempi meno "patologici", come gli spettri atomici di assorbimento ed emissione: un determinato livello energetico corrisponde ad un numero finito di stati puri della specie atomica sotto esame. Nel caso che un solo autostato ξ_a sia associato all'autovalore a di A, si dice che a è **non degenere**. In tal caso è evidente che lo stato risulta completamente identificato dall'autovalore a, per cui adotteremo la notazione $|a\rangle$ per indicare un qualunque autovettore rappresentativo di ξ_a.

Sia dunque a un autovalore non degenere dell'osservabile A e $|a\rangle$

un corrispondente vettore di stato. Supponiamo inoltre che il sistema $\mathcal{S}$ si trovi ad un certo istante in uno stato ξ descritto dal generico vettore $|\psi\rangle$. Misurando ripetutamente A, ogni volta con $\mathcal{S}$ preparato in ξ, si otterranno in generale diversi risultati, tra i quali il valore a di cui sopra. Dal punto di vista operativo, la frequenza relativa p_a di a caratterizza interamente la relazione esistente tra $|\psi\rangle$ e $|a\rangle$. Secondo la meccanica quantistica, tale relazione si scrive

$$p_a = \frac{|\langle a|\psi\rangle|^2}{\langle a|a\rangle\langle\psi|\psi\rangle} \,. \tag{7.5}$$

Si noti che $p_a \geq 0$ per costruzione, mentre $p_a \leq 1$ grazie alla diseguaglianza di Schwarz. La relazione (7.5) costituisce un vero e proprio postulato della meccanica quantistica. Non abbiamo voluto presentarla con lo stesso rilievo del Postulato I per ragioni di generalità, da un lato, e minimalità, dall'altro, che diverranno chiare solamente nel prosieguo.

La generalizzazione della formula (7.5) al caso di autovalori degeneri non comporta difficoltà. Se $n \geq 1$ vettori di stato $|a,j\rangle$, $j = 1,2,\ldots,n$, tra loro linearmente indipendenti, tutti descrivono stati del sistema fisico nei quali l'osservabile A vale certamente a, allora per il principio di sovrapposizione lineare anche una qualunque combinazione lineare degli stessi descrive un autostato di A corrispondente all'autovalore a. In altri termini, ad a risulta associato un intero sottospazio n-dimensionale $\mathcal{V}_a$ dello spazio di Hilbert $\mathcal{H}_\mathcal{S}$, e l'intero n prende il nome di **molteplicità** dell'autovalore a. Per costruzione, ogni vettore $|\psi\rangle$ di $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ ammette un'unica decomposizione

$$|\psi\rangle = \left|\psi_\parallel\right\rangle + |\psi_\perp\rangle \,,$$

dove la componente parallela $\left|\psi_\parallel\right\rangle$ è una combinazione lineare dei vettori $|a,j\rangle$, mentre la componente $|\psi_\perp\rangle$ è ortogonale ad essi: $\langle\psi_\perp|a,j\rangle = 0$. Sia $\hat{P}_a$ il proiettore ortogonale su $\mathcal{V}_a$, ovvero l'operatore lineare definito dalla relazione

$$\hat{P}_a|\psi\rangle = \left|\psi_\parallel\right\rangle \,, \quad \forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{H}_\mathcal{S} \,.$$

Ovviamente $\hat{P}_a^2 = \hat{P}_a$. In termini dei vettori $|a,j\rangle$ il proiettore si scrive

$$\hat{P}_a = \sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} |a,j\rangle \left(M^{-1}\right)_{jk} \langle a,k| \,,$$

dove $M_{jk} = \langle a,j|a,k\rangle$ (per ipotesi M è invertibile). Anche a partire da questa espressione è immediato verificare la relazione $\hat{P}_a^2 = \hat{P}_a$. Inoltre, poiché M_{jk} è una matrice hermitiana, $\overline{M}_{jk} = M_{kj}$, risulta evidente che $\hat{P}_a$ è un operatore autoaggiunto, $\hat{P}_a^\dagger = \hat{P}_a$. La versione dell'espressione

(7.5) generalizzata al caso di degenerazione finita si scrive quindi

$$p_a = \frac{\langle\psi|\,\hat{P}_a\,|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\,. \tag{7.6}$$

Va sottolineato che questa formula, dovendo rappresentare una probabilità, che è un numero reale per ogni $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_S$, richiede espressamente che $\hat{P}_a$ sia autoaggiunto. Qualora i vettori $|a,j\rangle$ siano stati opportunamente ortonormalizzati, $M_{jk} = \delta_{jk}$, la stessa probabilità diventa

$$p_a = \sum_{j=1}^{n} \frac{|\langle a,j|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle}\,,$$

espressione che generalizza in modo immediato la (7.5). Si noti inoltre che, in uno spazio di Hilbert separabile, non esiste alcun problema per estendere le suddette espressioni al caso in cui $n \to \infty$. Questa è proprio la situazione, come abbiamo già notato, nelle misurazioni delle funzioni caratteristiche associate ad osservabili continue.

La domanda che sorge naturalmente è quale sia lo stato del sistema, originariamente descritto da $|\psi\rangle$, subito dopo un esperimento di prima specie in cui è stato osservato il valore a dell'osservabile A. Secondo Dirac [**Dir59**] è necessario invocare un principio di continuità fisica, secondo il quale una ripetizione immediata della stessa misura non può che dare il medesimo risultato a. Quindi, essendo ora noto con certezza il risultato dell'esperimento, il sistema deve trovarsi in uno stato descritto da una combinazione lineare dei vettori $|a,j\rangle$. In altri termini, l'effetto della prima misurazione è stato quello di "**ridurre**" o "**precipitare**" lo stato del sistema da quello originale, descritto da $|\psi\rangle$, ad un autostato di A descritto da un vettore di $\mathcal{V}_a$ (non necessariamente $|\psi_\parallel\rangle$, a meno che $\mathcal{V}_a$ sia monodimensionale). Non è facile (e forse non è neanche possibile) dare una caratterizzazione in termini fisici concreti di questa "precipitazione", per svariati motivi. Ad esempio, quanto dura veramente una osservazione? E, conseguentemente, cosa vuol dire "immediatamente dopo"? Torneremo brevemente in seguito su questa spinosa e controversa questione.

Consideriamo ora due autovalori distinti, a e a', della medesima osservabile discreta A, ed i corrispondenti proiettori $\hat{P}_a$ e $\hat{P}_{a'}$. La regola fondamentale (7.6) e la richiesta che un esperimento di prima specie atto a determinare il valore di A dia sempre risultati non ambigui (un fatto peraltro sperimentalmente accertato[5]) implicano allora che $\hat{P}_a$ e $\hat{P}_{a'}$,

[5] È sottinteso che l'esperimento in questione deve possedere, dal punto di vista prettamente operativo, un sufficiente potere risolutivo per distinguere a da a'; questo

ovvero $\mathcal{V}_a$ e $\mathcal{V}_{a'}$, sono ortogonali:

$$\hat{P}_a \hat{P}_{a'} = \hat{P}_{a'} \hat{P}_a = 0 \Longleftrightarrow \langle\psi|\phi\rangle = 0 \,, \quad \forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{V}_a \,,\ \forall\, |\phi\rangle \in \mathcal{V}_{a'} \,.$$

Infatti, se il sistema si trova in uno stato descritto da un qualunque vettore $|\psi\rangle$ di $\mathcal{V}_a$, l'osservazione di A deve dare il risultato a, per cui la probabilità di osservare il valore a' deve essere nulla:

$$0 = \langle\psi|\,\hat{P}_{a'}\,|\psi\rangle = \|\hat{P}_{a'}\psi\|^2 \,,$$

vale a dire $\hat{P}_{a'}\,|\psi\rangle = 0$, $\forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{V}_a$. Lo stesso ovviamente vale scambiando i ruoli di a e a'.

Siano ora $a_1, a_2, \ldots$ tutti i possibili autovalori di A, i quali formano quindi lo spettro $\sigma(A)$ di A (che per ora abbiamo assunto essere discreto). Siano inoltre $\hat{P}_{a_1}, \hat{P}_{a_2}, \ldots$ i corrispettivi proiettori. Poiché

$$\hat{P}_{a_j} \hat{P}_{a_k} = \hat{P}_{a_k} \hat{P}_{a_j} = \delta_{jk} \hat{P}_{a_j} \,, \tag{7.7}$$

otteniamo subito che, $\forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, il vettore

$$|\psi'\rangle = |\psi\rangle - \sum_j \hat{P}_{a_j}\,|\psi\rangle$$

è annichilato da tutti i proiettori: $\hat{P}_{a_j}\,|\psi'\rangle = 0$, $\forall j$. Dalla relazione (7.6) segue allora che $|\psi'\rangle$ descrive uno stato del sistema tale che la probabilità di osservare qualunque valore di A vale zero. Ma un esperimento atto ad osservare A deve sempre dare un risultato non ambiguo, per cui necessariamente $|\psi'\rangle = 0$, ovvero

$$\sum_j \hat{P}_{a_j} = \mathbb{1} \,. \tag{7.8}$$

In altri termini, ogni vettore di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ può essere sviluppato in autovettori di A, i quali formano perciò un sottoinsieme completo di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. Le due relazioni (7.7) e (7.8) caratterizzano l'insieme $\{\hat{P}_a,\ a \in \sigma(A)\}$ come un **insieme ortogonale completo** di operatori di proiezione. Conviene qui precisare il significato matematico dell'identità operatoriale (7.8), soprattutto perché la sommatoria è in generale infinita: $\forall \epsilon > 0$ e $\forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, esiste un intero N abbastanza grande per cui $\|(\hat{E}_N - \mathbb{1})\psi\| < \epsilon$, dove

---

è banalmente vero nel caso delle funzioni caratteristiche, ovvero delle proiezioni ortogonali: ad esempio, una particella o viene localizzata in un certo dominio o non viene localizzata nello stesso, un fotone o passa o non passa attraverso un polarizzatore. Nel caso di sistemi molto complessi, possono tuttavia esistere osservabili fondamentali discrete, il cui spettro non è praticamente risolvibile, nel senso di una determinazione operativa della corrispondente famiglia spettrale. Conviene allora restringere la nostra analisi a sistemi sufficientemente semplici, recuperando quelli complessi come combinazione di tanti sistemi semplici. Detto in altri termini, appare estremamente arduo riuscire a formulare in termini puramente operazionalisti la descrizione dei sistemi macroscopici.

$\hat{E}_N = \sum_{j=1}^{N} \hat{P}_{a_j}$ è anch'esso un proiettore (grazie alla relazione di ortogonalità (7.7)). Al variare di N si ottiene la cosiddetta **famiglia spettrale** $\{\hat{E}_N, N = 0, 1, 2, \ldots\}$ dell'osservabile A, caratterizzata dalle relazioni, equivalenti alle Eq. (7.7) e (7.8)

$$\hat{E}_N \hat{E}_{N'} = \hat{E}_{N'} \hat{E}_N = \hat{E}_N \,, \quad \forall N \leq N' \tag{7.9}$$

e

$$\hat{E}_0 = 0 \,, \quad \lim_{N \to \infty} \hat{E}_N = 1 \,. \tag{7.10}$$

A questo punto possiamo facilmente costruire un operatore lineare che rappresenti l'osservabile A. Si tratta di correlare matematicamente le due affermazioni "il sistema si trova in uno stato descritto da un vettore di $\mathcal{V}_a$" e "l'osservabile A assume il valore a". Infatti, l'operatore lineare

$$\hat{A} = \sum_j a_j \hat{P}_{a_j} = \sum_{a \in \sigma(A)} a \hat{P}_a \tag{7.11}$$

possiede come autovettore in senso matematico ogni autovettore $|a\rangle$ di A, inteso come vettore di $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ rappresentativo di un autostato di A:

$$\hat{A}\,|a\rangle = a\,|a\rangle \,, \quad a \in \sigma(A) \,.$$

In termini dei proiettori $\hat{P}_a$, abbiamo

$$\hat{A}\hat{P}_a = \sum_{b \in \sigma(A)} b \hat{P}_b \hat{P}_a = \sum_{b \in \sigma(A)} b \delta_{ab} \hat{P}_b = a \hat{P}_a \,.$$

Come nel caso della (7.8), anche l'Eq. (7.11) va propriamente intesa: per la completezza della famiglia spettrale, un qualunque vettore $|\psi\rangle$ è il limite per $N \to \infty$ della sequenza di Cauchy $\{\hat{E}_N\,|\psi\rangle\}$; quindi la (7.11) va intesa nel senso che se la successione $\sum_{j=1}^{N} a_j \hat{P}_{a_j}\,|\psi\rangle$ converge, $A\,|\psi\rangle$ ne è il limite e $|\psi\rangle$ appartiene al dominio $\mathcal{D}(\hat{A})$ dell'operatore $\hat{A}$.

Essendo una combinazione di operatori autoaggiunti con coefficienti reali, $\hat{A}$ è un operatore autoaggiunto. Dunque ad ogni osservabile (discreta) A del sistema fisico in esame risulta associato un operatore autoaggiunto $\hat{A}$. Il primo esempio di questa corrispondenza è quello banale: le osservabili il cui valore non dipende dallo stato del sistema sono rappresentate in $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ da multipli dell'operatore identità $\mathbb{1}$.

Il caso di osservabili dotate di uno spettro interamente o parzialmente continuo, non richiede, almeno al livello formale, una trattazione molto più elaborata. Supponiamo che A possieda uno spettro puramente continuo, che denotiamo $\sigma_c(A)$. Ad ogni parametro reale $a \in \sigma_c(A)$ risulta associata la funzione caratteristica $E(a)$ che vale 1 se A assume un valore minore di a e 0 altrimenti. Dato che $E(a)$ è un'osservabile discreta, ad essa corrisponde, per quanto visto sopra, un operatore autoaggiunto $\hat{E}(a)$ con autovalori 0 ed 1, che possiede tutti i requisiti di un proiettore.

La continuità dello spettro si traduce nella continuità di $\hat{E}(a)$, nel senso che $\langle\phi|\,\hat{E}(a)\,|\psi\rangle$ è una funzione continua di a per ogni $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$ in $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. Inoltre, per costruzione, se $a \le a'$, abbiamo

$$\hat{E}(a)\,\hat{E}(a') = \hat{E}(a')\,\hat{E}(a) = \hat{E}(a)\,,$$

mentre necessariamente

$$\lim_{a\to-\infty} \hat{E}(a) = 0\,, \quad \lim_{a\to\infty} \hat{E}(a) = 1\,.$$

Queste relazioni rappresentano la versione continua delle (7.9) e (7.10), per cui $\{\hat{E}(a),\, a \in R\}$ costituisce una famiglia spettrale completa, continua, di proiettori ortogonali. Ovviamente, se $\inf \sigma_c(A)$ è finito, allora $\hat{E}(a) = 0$ per $a < \inf \sigma_c(A)$, mentre $\hat{E}(a) = 1$ per tutti i a maggiori di un $\sup \sigma_c(A)$ eventualmente finito.

Possiamo includere nel formalismo anche un'eventuale parte discreta, dello spettro, che denotiamo $\sigma_d(A)$ (per cui $\sigma(A)$ coincide con l'unione disgiunta di $\sigma_c(A)$ e $\sigma_d(A)$), richiedendo la sola continuità a destra della famiglia spettrale

$$\lim_{\epsilon\to 0} \hat{E}(a+\epsilon) = \hat{E}(a)\,, \quad \forall a \in \mathbb{R}\,,$$

mentre

$$\lim_{\epsilon\to 0} \hat{E}(a-\epsilon) = \hat{E}(a) - \hat{P}_a\,, \quad \forall a \in \sigma_d(A)\,,$$

dove $\hat{P}_a$ è il proiettore sull'autosottospazio $\mathcal{V}_a$ associato all'autovalore a. In termini della famiglia spettrale $\{\hat{E}(a),\, a \in R\}$, la ricostruzione dell'operatore $\hat{A}$ corrispondente all'osservabile A si scrive ora

$$\hat{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} a\, d\hat{E}(a) = \sum_{a\in\sigma_d(A)} a\hat{P}_a + \int_{a\in\sigma_c(A)} a\, d\hat{E}(a)\,, \tag{7.12}$$

dove l'integrazione con la **misura a valori operatoriali** $d\hat{E}(a)$ può essere rigorosamente definita [**BRS93**] (vedi anche l'App. B.9). L'espressione (7.12) definisce allora un operatore autoaggiunto. Tramite la misura $d\hat{E}(a)$, la nozione di famiglia spettrale può essere estesa all'insieme $\mathfrak{B}$ dei sottoinsiemi boreliani della retta reale: ad ogni $b \in \mathfrak{B}$ corrisponde l'operatore di proiezione ortogonale

$$\hat{E}_A(b) = \int_b d\hat{E}(a)\,,$$

il quale fornisce la rappresentazione matematica dell'osservabile $E_A(b)$, ovvero della funzione caratteristica dell'osservabile A che vale 1 non appena A assume un valore compreso in b (si veda al §7.1).

Siamo finalmente in posizione per formulare in modo del tutto generale gli altri due fondamentali postulati della meccanica quantistica, vale a dire

Postulato II

Ogni osservabile A di $\mathcal{S}$ è rappresentata da un operatore lineare autoaggiunto $\hat{A}$ su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$.

Postulato III

Se $|\psi\rangle$ è un vettore di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ rappresentativo del raggio corrispondente allo stato puro ξ in cui si trova il sistema $\mathcal{S}$ al momento della misurazione dell'osservabile A, allora la probabilità di ottenere un valore compreso nel sottoinsieme boreliano $\mathfrak{b}$ è data da

$$\Pr_A(\mathfrak{b}|\,\xi) = \frac{\langle\psi|\,\hat{E}_A(\mathfrak{b})\,|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\,, \tag{7.13}$$

dove $\{\hat{E}_A(\mathfrak{b})\}$ costituisce la famiglia spettrale di $\hat{A}$.

Quest'ultima formula generalizza l'espressione (7.6) al caso in cui l'osservabile A possieda una parte continua $\sigma_c(A)$ dello spettro. Laddove $\mathfrak{b}\cap\sigma_c(A) = \varnothing$, essa si riduce alla (7.6), poiché al di fuori di $\sigma_c(A)$ la misura $d\hat{E}(a)$ si concentra sui punti dello spettro discreto: $d\hat{E}(a) = \sum_j \delta(a - a_j)\,\hat{P}_{a_j}\,da$, $a \notin \sigma_c(A)$. In ogni caso appare evidente che le grandezze fisiche (cioè quelle confrontabili con gli esperimenti) del formalismo della meccanica quantistica sono, al livello fondamentale, i moduli quadri dei prodotti scalari tra vettori di stato normalizzabili.

Si osserverà che l'ordine logico di questi due postulati procede in modo opposto rispetto alla discussione che li ha introdotti. Tale discussione ha fatto uso di una nozione puramente operativa di autovalori ed austostati di una osservabile, ed è partita da una versione particolare, Eq. (7.5), del Postulato III, per arrivare prima alle famiglie spettrali e poi agli operatori autoaggiunti. Dal punto di vista assiomatico (nonché all'atto pratico) il Postulato II deve ovviamente precedere il terzo. Il postulato I fissa la rappresentazione matematica degli stati puri, il secondo quella delle osservabili, mentre il terzo esprime le regole per calcolare il risultato degli esperimenti, ovvero la distribuzione di probabilità per i valori sperimentali di ciascuna osservabile. Tuttavia la possibilità di dedurre la rappresentazione delle osservabili in termini di operatori autoaggiunti, a partire dalla forma (7.5) del postulato III, suggerisce che i tre postulati fondamentali della meccanica quantistica non siano veramente indipendenti. In effetti, questa è la conseguenza di un teorema rigoroso, il teorema di Gleason, che illustreremo più avanti.

Si noti che il postulato III si applica a tutti gli esperimenti, sia di prima che di seconda specie; una distinzione tra queste due classi di esperimenti è tuttavia indispensabile per stabilire quale è effettivamente lo stato del

sistema al momento di effettuare una osservazione, ovvero quale vettore di stato $|\psi\rangle$ rappresenta la preparazione del sistema e va inserito nella formula delle probabilità (7.13).

Dal punto di vista pratico, il potere predittivo della meccanica quantistica dipende dal poter identificare a priori l'operatore autoaggiunto corrispondente ad una data osservabile (si veda per esempio il §7.8). In tal caso, il senso della relazione (7.12) va rovesciato: dato l'operatore autoaggiunto $\hat{A}$ su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, che per ipotesi rappresenta l'osservabile A, il problema consiste nel determinare la sua **decomposizione spettrale**, ovvero la famiglia $\{\hat{E}(a),\, a \in R\}$ per la quale vale la (7.12). L'esistenza e l'unicità di tale famiglia per ogni operatore autoaggiunto è garantita dal cosiddetto **teorema spettrale** [**Neu55, Sto32**]. Dal postulato III segue allora che i valori sperimentalmente osservabili coincidono con lo spettro in senso matematico dell'operatore $\hat{A}$, ovvero con il supporto della misura a valori operatoriali $d\hat{E}(a)$. In particolare, se tale supporto è parzialmente o interamente discreto, così deve essere lo spettro dell'osservabile dal punto di vista sperimentale, spesso in contrasto con la natura classicamente continua dell'osservabile stessa. Abbiamo già incontrato vari esempi di questo tipo al cap. 5, nei quali l'osservabile in questione è l'energia del sistema $\mathcal{S}$. Ne esamineremo altri nel seguito (vedi cap. 8).

Il postulato II afferma che ad ogni osservabile del sistema $\mathcal{S}$ corrisponde un operatore autoaggiunto su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. È naturale ora domandarsi se vale anche il viceversa, cioè se qualunque operatore autoaggiunto rappresenti una vera e propria osservabile del sistema, nel senso operativo del termine. Nel §7.5 discuteremo le limitazioni di principio ad una tale possibilità dovute alla presenza eventuale di *regole di superselezione* sullo spazio degli stati puri. Ancor prima però esistono delle severe limitazioni pratiche sulla possibilità di individuare l'osservabile, nella nozione operativa della stessa in cui vanno specificate le apparecchiature e le procedure sperimentali, che corrisponde ad un arbitrario operatore autoaggiunto. In tutte le situazioni concrete le osservabili veramente sotto controllo, al livello sperimentale, sono poche e coincidono con quelle "fondamentali", come posizioni, momenti, momenti angolari ed energie, e relative famiglie spettrali.

D'altra parte, l'applicazione incondizionata del principio di sovrapposizione lineare, affermando che ogni vettore $|\psi\rangle$ di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ descrive uno stato puro di $\mathcal{S}$ fisicamente realizzabile, comporta che l'operatore autoaggiunto $|\psi\rangle\langle\psi|$ corrisponde ad una osservabile di $\mathcal{S}$, anche se molto difficile, in generale, da identificare esplicitamente in termini operativi. Se $|\psi\rangle$ è normalizzato, allora $|\psi\rangle\langle\psi|$ è un proiettore e corrisponde ad una particolare funzione caratteristica (di una o più osservabili, purché compatibili), misurabile mediante una specifica classe di esperimenti di tipo "si o no".

La distribuzione di probabilità per i risultati di questi esperimenti viene fissata dal postulato III: se $|\psi\rangle$, è il vettore di stato normalizzato che descrive lo stato puro ξ in cui è stato precedentemente preparato il sistema $\mathcal{S}$, allora la probabilità di osservare il sistema nello stato ξ' descritto dal vettore $|\psi'\rangle$, pure normalizzato, vale

$$\Pr(\xi \to \xi') = |\langle\psi'|\psi\rangle|^2 . \tag{7.14}$$

A questa espressione viene comunemente dato il nome di **probabilità di transizione** dallo stato descritto da $|\psi\rangle$ a quello descritto da $|\psi'\rangle$. Va ricordato però che essa fa riferimento soltanto al possibile risultato di un esperimento in cui si misura quell'osservabile che possiede $|\psi'\rangle$ come autovettore con autovalore 1, ed il complemento ortogonale di $|\psi'\rangle$ come autospazio con autovalore 0.

Al variare dei raggi che contengono $|\psi\rangle$ e $|\psi'\rangle$ in tutto lo spazio proiettivo $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}/\mathbb{C}^*$, le probabilità (7.14) rappresentano la totalità del contenuto fisico, cioè sperimentalmente verificabile, dello spazio di Hilbert dei vettori di stato. Il contenuto fisico della meccanica quantistica sta dunque nella struttura metrica dello spazio dei raggi $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}/\mathbb{C}^*$. La nozione di *distanza* $d(r_1, r_2)$ tra due punti r_1 e r_2 di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}/\mathbb{C}^*$ discende naturalmente dall'Eq. (7.14), ad esempio nella forma

$$d(r_1, r_2) = \left[1 - \frac{|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2}{\langle\psi_1|\psi_1\rangle\langle\psi_2|\psi_2\rangle}\right]^{1/2} ,$$

dove $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ sono due arbitrari vettori (non-nulli) appartenenti a r_1 e r_2, rispettivamente.

PROBLEMA 7.3-2 []Si verifichi che $d(r_1, r_2)$ soddisfa alle tre proprietà definitorie di una funzione distanza, vale a dire $d(x, y) = 0$ se e solo se $x = y$, $d(x, y) = d(y, x)$ e $d(x, z) \le d(x, y) + d(y, z)$.

PROBLEMA 7.3-3 []Nel caso di CP^1, lo spazio dei raggi di $\mathbb{C}^2$, la funzione $d(r_1.r_2)$ definisce una distanza sulla sfera S^2. Qual è la relazione con la metrica indotta su S^2 dall'usuale immersione $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ nello spazio Euclideo $\mathbb{R}^3$?

In definitiva, dunque, ciò che viene misurato negli esperimenti è proprio la distanza fra i raggi di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, la quale quantifica la diversità dei vari stati puri di $\mathcal{S}$.

7.3.1. Valori medi ed indeterminazioni. La probabilità $\Pr_A(\mathfrak{b}|\,\xi)$ di osservare un valore di A compreso in $\mathfrak{b}$ coincide con il valor medio della corrispondente funzione caratteristica $E_A(\mathfrak{b})$ (Eq. (7.4))

$$\Pr_A(\mathfrak{b}|\,\xi) = \langle E_A(\mathfrak{b})\rangle_\xi .$$

Confrontata con il postulato III, questa relazione diventa

$$\langle E_A(b)\rangle_\xi = \frac{\langle\psi|\,\hat{E}_A(b)\,|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{7.15}$$

dove per ipotesi $|\psi\rangle$ descrive lo stato puro ξ. Data la decomposizione spettrale (7.12) dell'operatore autoaggiunto $\hat{A}$ corrispondente all'osservabile A, dalla (7.15) otteniamo infine la rappresentazione quantomeccanica dei valori medi per una qualunque osservabile, cioè

$$\langle A\rangle_\xi = \frac{\langle\psi|\,\hat{A}\,|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\,. \tag{7.16}$$

Va sottolineato che affermare la validità di questa espressione per *ogni* osservabile equivale esattamente all'affermazione del postulato III.

La dispersione dei risultati sperimentali attorno al valor medio è caratterizzata dalla deviazione standard, o indeterminazione (vedi (7.3))

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A\rangle)^2\rangle} = \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2}\,,$$

ovvero, in termini di $\hat{A}$ e $|\psi\rangle$,

$$\Delta A = \left[\langle\psi|\,\hat{A}^2\,|\psi\rangle - \langle\psi|\,\hat{A}\,|\psi\rangle^2\right]^{1/2}$$

dove per brevità si è assunto che $|\psi\rangle$ è normalizzato, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Si noti che, essendo $\hat{A}$ autoaggiunto, ΔA coincide con la norma del vettore $(\hat{A} - \langle A\rangle)\,|\psi\rangle$

$$\Delta A = \left[\langle\psi|\,(\hat{A} - \langle A\rangle)^2\,|\psi\rangle\right]^{1/2} = \|(\hat{A} - \langle A\rangle)\psi\|\,,$$

per cui $\Delta A = 0$ se e solo se $|\psi\rangle$ è un autovettore di $\hat{A}$, nel qual caso il valor medio coincide con il corrispondente autovalore, che è il risultato certo dell'esperimento, in accordo con la discussione del §7.1.

7.3.2. Commutatori ed osservabili compatibili. Consideriamo ora due osservabili A e B pertinenti al sistema fisico $\mathcal{S}$, e supponiamo che esse siano compatibili, nel senso discusso al §7.1.1. Questo significa che deve essere possibile preparare il sistema $\mathcal{S}$ in uno stato puro in cui sia A che B assumono certamente un ben preciso valore, rispettivamente a e b (per semplificare la trattazione, consideriamo inizialmente il caso di due osservabili discrete e limitate). In altri termini, $\Delta A = \Delta B = 0$ e lo stato in questione deve essere descritto da un autovettore simultaneo di $\hat{A}$ e $\hat{B}$, che indicheremo con $|a, b, \tau\rangle$, dove l'ulteriore indice τ serve a risolvere l'eventuale degenerazione della coppia di autovalori (a, b). Per l'ipotesi di compatibilità questo discorso vale per ogni coppia (a, b) dello spettro congiunto delle due osservabili. D'altronde, come sappiamo, sia gli autovettori di $\hat{A}$ che quelli di $\hat{B}$ formano una base ortogonale dello

spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. Quindi $\hat{A}$ e $\hat{B}$ ammettono un insieme completo di autovettori comuni, cioè sono *diagonalizzabili simultaneamente*:

$$\hat{A}\,|a,b,\tau\rangle = a\,|a,b,\tau\rangle \ , \qquad \hat{B}\,|a,b,\tau\rangle = b\,|a,b,\tau\rangle \ . \tag{7.17}$$

Risulta evidente da queste relazioni che

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\,|a,b,\tau\rangle = 0$$

Dovendo valere per un insieme completo di vettori, questo implica che il **commutatore**

$$[\hat{A}\,,\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

si annulla identicamente.

Viceversa, supponiamo che due osservabili discrete A e B siano rappresentate da due operatori autoaggiunti e limitati che commutano, $[\hat{A},\hat{B}] = 0$. Allora, se $|a\rangle$ è un autovettore di $\hat{A}$ corrispondente all'autovalore a, anche il vettore $B\,|a\rangle$ lo è:

$$\hat{A}\hat{B}\,|a\rangle = \hat{B}\hat{A}\,|a\rangle = a\hat{B}\,|a\rangle \ .$$

Questo implica, nel caso in cui a sia un autovalore non degenere, che $|a\rangle$ e $\hat{B}\,|a\rangle$ sono proporzionali, ovvero $|a\rangle$ è anche autostato di $\hat{B}$. Più in generale, supponiamo che $|a\rangle$ appartenga ad un autospazio $\mathcal{V}_a$ di dimensione $n \geq 1$, con $|a,\tau\rangle$, $\tau = 1,2,\ldots,n$ come vettori di base. In quanto autovettore di $\hat{A}$, ogni $\hat{B}\,|a,\tau\rangle$ deve appartenere ancora a $\mathcal{V}_a$ ed essere esprimibile come combinazione lineare degli stessi vettori $|a,\tau\rangle$, $\tau = 1,2,\ldots,n$. In altre parole, l'operatore $\hat{B}$ agisce all'interno di ciascun autospazio $\mathcal{V}_a$, $a \in \sigma(A)$, senza connettere fra loro autospazi corrispondenti ad autovalori distinti. Quest'ultimo fatto si esprime dicendo che $\hat{B}$ possiede **elementi di matrice** nulli tra vettori di $\mathcal{V}_a$ e $\mathcal{V}_{a'}$, qualora $a \neq a'$

$$\langle a',\tau'|\,\hat{B}\,|a,\tau\rangle = 0 \ .$$

La diagonalizzazione di $\hat{B}$ non comporta quindi alcun mescolamento di autovettori di $\hat{A}$ corrispondenti ad autovalori diversi, e si riduce ad una riduzione della degenerazione indicizzata da τ, cioè alla relazione (7.17). Ma allora $\Delta A = \Delta B = 0$ per qualunque coppia di valori degli spettri delle due osservabili, che sono perciò compatibili. In definitiva, abbiamo verificato che *due osservabili (discrete e limitate) sono compatibili se e solo se i corrispondenti operatori autoaggiunti commutano.* L'estensione di questa fondamentale proprietà ad osservabili illimitate e/o dotate di spettro continuo richiede solo un minimo di cautela. Il discorso appena fatto è chiaramente ripetibile per le rispettive funzioni caratteristiche $E_A(a)$ e $E_B(b)$ e relative famiglie spettrali $\hat{E}_A(a)$ e $\hat{E}_B(b)$, che sono per costruzione operatori limitati e con spettro discreto. D'altronde la compatibilità, nel senso operativo del termine, di A e B è sinonimo della compatibilità di

$E_A(a)$ e $E_B(b)$, per cui concludiamo che A e B sono compatibili se e solo se le corrispondenti famiglie spettrali commutano, $[\hat{E}_A(a), \hat{E}_B(b)] = 0$. Si noti che questo implica senz'altro che $[\hat{A}, \hat{B}]$ si annulla su di un insieme di vettori denso nello spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, mentre il viceversa non è sempre vero. In ogni caso, l'annullarsi di $[\hat{E}_A(a), \hat{E}_B(b)]$, imposto dalla compatibilità, è sufficiente per dimostrare che $\hat{A}$ e $\hat{B}$ ammettono una base comune di autovettori ortogonali (da intendersi, se necessario, nel senso generalizzato del termine).

Osservazione *[]A questo punto possiamo far cadere la differenza di notazione tra la generica osservabile* A *e l'operatore autoaggiunto* $\hat{A}$ *che la rappresenta, omettendo il cappuccio* ^*. Lo stesso termine,* osservabile*, verrà usato per entrambi. Talvolta poi adotteremo l'uso corrente, che non fa distinzione, dal punto di vista linguistico, tra stati puri (raggi dello spazio di Hilbert) e vettori di stato che li rappresentano. Con la scrittura "dato uno stato* $|\psi\rangle$ *etc." verrà perciò inteso "dato un vettore di stato* $|\psi\rangle$ *rappresentativo di un definito stato puro etc.".*

Osservabili nei sistemi composti. In base alla discussione del §7.2.1, sappiamo che gli stati puri del sistema composto $\mathcal{S}_1 \cup \mathcal{S}_2$ sono in corrispondenza biunivoca con i raggi dello spazio di Hilbert $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ (per brevità poniamo $\mathcal{H}_j \equiv \mathcal{H}_{\mathcal{S}_j}$) . Ci poniamo ora il problema di determinare la rappresentazione matematica delle osservabili di $\mathcal{S}_1 \cup \mathcal{S}_2$ a partire da quella delle osservabili di $\mathcal{S}_1$ e di $\mathcal{S}_2$. Per definizione un'osservabile A solo di $\mathcal{S}_1$ è anche un'osservabile del sistema composto compatibile con tutte le osservabili di $\mathcal{S}_2$. Quindi A, come operatore su $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, deve commutare con tutti gli operatori autoaggiunti che rappresentano osservabili solo di $\mathcal{S}_2$. Assumendo che questi ultimi formino un insieme irriducibile di operatori su $\mathcal{H}_2$, se ne deduce che A deve agire come l'identità su $\mathcal{H}_2$. Simbolicamente questo si scrive

$$A^{(1)} := A\Big|_{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2} = A\Big|_{\mathcal{H}_1} \otimes \mathbb{1} = A \otimes \mathbb{1} \, .$$

Analogamente, per una osservabile B solo di $\mathcal{S}_2$ si avrà

$$B^{(2)} := B\Big|_{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2} = \mathbb{1} \otimes B\Big|_{\mathcal{H}_2} = \mathbb{1} \otimes B \, .$$

Dato che

$$A^{(1)} B^{(2)} = B^{(2)} A^{(1)} = A \otimes B \, ,$$

possiamo affermare che il prodotto in senso operativo delle due osservabili compatibili $A^{(1)}$ e $B^{(2)}$ corrisponde al **prodotto diretto o tensoriale** $A \otimes B$ dei relativi operatori.

7.3.3. Relazioni di intederminazione. Nel caso di due osservabili A e B, tra loro *non commutanti*, è possibile fornire un limite inferiore al prodotto delle due indeterminazioni $\Delta A\,\Delta B$, se il sistema è stato preparato nello stato descritto da $|\psi\rangle$. Infatti, assumendo che $|\psi\rangle$, $A|\psi\rangle$ e $B|\psi\rangle$ appartengano a $\mathcal{D}(A)\cap\mathcal{D}(B)$, si dimostra che

$$\boxed{\Delta A\,\Delta B \geq \tfrac{1}{2}\,|\langle\psi|\,[A\,,B]\,|\psi\rangle|\ .} \tag{7.18}$$

La diseguaglianza (7.18) è nota come **relazione di indeterminazione (generalizzata)** e rappresenta l'espressione matematica del principio di Heisenberg. Per dimostrarla, si considerino gli operatori autoaggiunti $\tilde{A} = A - \langle A\rangle$ e $\tilde{B} = B - \langle B\rangle$ e la famiglia ad un parametro $\tilde{A} + i\lambda\tilde{B}$, λ reale. Per la positività della norma si ottiene

$$\begin{aligned} 0 \leq \|(\tilde{A} + i\lambda\tilde{B})\psi\|^2 &= \langle\psi|\,(\tilde{A} - i\lambda\tilde{B})(\tilde{A} + i\lambda\tilde{B})\,|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\,\tilde{A}^2\,|\psi\rangle + i\lambda\,\langle\psi|\,[\tilde{A}\,,\tilde{B}]\,|\psi\rangle + \lambda^2\,\langle\psi|\,\tilde{A}^2\,|\psi\rangle \\ &= (\Delta A)^2 + i\lambda\,\langle\psi|\,[A\,,B]\,|\psi\rangle + \lambda^2(\Delta B)^2\ . \end{aligned}$$

Si noti che l'operatore $i[A\,,B]$ è simmetrico, per cui la forma quadratica in λ ha coefficienti reali. Poiché essa è nonnegativa, il suo discriminante deve essere nonpositivo,

$$\langle\psi|\,i[A\,,B]\,|\psi\rangle^2 - 4(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \leq 0$$

e la relazione di indeterminazione (7.18) segue immediatamente. Si noti inoltre che entrambi i termini della suddetta disequaglianza si annullano qualora $|\psi\rangle$ sia un autostato di una delle due osservabili. Supponiamo che $B|\psi\rangle = b\,|\psi\rangle$. Allora per definizione $\Delta B = 0$, mentre $\langle\psi|\,[A\,,B]\,|\psi\rangle = b(\langle A\rangle - \langle A\rangle) = 0$.

Osservazione *[]È importante ricordare che quanto detto vale se* $|\psi\rangle$ *è un autovettore* B *in senso stretto, non in senso generalizzato, e che comunque per affermare la relazione* (7.18) *è necessario che* $A|\psi\rangle$ *appartenga al dominio di definizione di* B *e viceversa. In caso contrario, è facile credere di poter trovare dei controesempi. Nel caso delle coppia di osservabili canonicamente coniugate, la posizione ed il momemto, su* $\mathcal{L}_2(R)$*, abbiamo* $i[p\,,q] = 1$*,* $(\hbar = 1)$*, ma né l'una né l'altra possiedono autovettori in senso stretto. Se invece vogliamo considerare tale coppia sullo spazio delle funzioni a quadrato sommabile sul cerchio,* $\mathcal{L}_2(S^1)$*, nella rappresentazione usuale dove* $p = -id/dx$*,* $q = x$ *e* $x \in [0, 2\pi)$ *denota l'angolo, allora* $x\psi(x)$ *non appartiene al dominio di definizione di* p *qualora* $\psi(x) = e^{inx}$ *sia autofunzione di* p*. Quindi il commutatore* $[p\,,q]$ *non risulta definito sulle autofunzioni di* p *e non si ottiene alcuna contraddizione con l'osservazione che per tali autofunzioni* $\Delta p = 0$*, mentre* Δq *è finito per definizione.*

Osservazione *[]Un altro aspetto che conviene sottolineare a proposito delle relazioni di indeterminazione* (7.18) *riguarda il loro preciso significato operativo. Le grandezze* ΔA *e* ΔB *fanno riferimento alla dispersione sui valori misurati di* A *e di* B *in sequenze di esperimenti* identici e indipendenti*. In ognuno di questi esperimenti il sistema viene preparato nello stesso stato, descritto dal vettore* $|\psi\rangle$ *, e quindi sottoposto alla misurazione o di* A *o di* B *o di* $i[A, B]$ *(comunque non di* A *e* B *simultaneamente). Quindi* ΔA *e* ΔB *non vanno confusi con le imprecisioni proprie di un esperimento in cui si cerchi di misurare allo stesso tempo* A *e* B *. D'altra parte, in certi casi particolari risulta effettivamente possibile mettere in relazione il limite inferiore di tali imprecisioni con* $\Delta A \Delta B$ *. Si pensi ad esempio alle argomentazioni addotte originariamente dallo stesso Heisenberg per dedurre il principio di indeterminazione tra posizione e momento* [**Hei63**].

7.3.4. Insiemi completi di osservabili compatibili (II). Abbiamo appena visto come un'osservabile B compatibile con un'altra data osservabile A serva a ridurre l'eventuale degenerazione degli autovalori di quest'ultima. Si intende che A e B sono osservabili indipendenti, nel senso che un preciso valore assunto da una non fissa necessariamente il valore dell'altra. In caso contrario B sarebbe una funzione di A, e la sua conoscenza non aggiungerebbe alcuna informazione sullo stato del sistema. Il processo di riduzione della degenerazione può evidentemente continuare, prendendo in considerazione un'ulteriore osservabile C compatibile sia con A che con B ed indipendente da esse, e via di seguito. Abbiamo già discusso questa situazione al paragrafo 7.1.1 e potremmo ripetere la trattazione parola per parola: ora per osservabili compatibili intendiamo operatori autoaggiunti e commutanti, mentre la richiesta di indipendenza significa che nessuna delle osservabili può venire espressa come funzione delle altre (funzioni di operatori commutanti non soffrono di alcuna ambiguità di ordinamento e quindi corrispondono esattamente alla nozione intuitiva di relazione funzionale tra diversi risultati numerici di esperimenti). Anche la nozione di *completezza* di un dato insieme di osservabili compatibili riceve ora una precisa caratterizzazione matematica. Il processo di raffinamento della nostra informazione sullo stato del sistema termina quando la degenerazione degli autovalori viene completamente rimossa: un insieme $A_1, A_2, \ldots, A_n$ di osservabili compatibili è completo se e solo se ad un fissata n-upla di autovalori $(a_1, a_2, \ldots, a_n)$ corrisponde un sottospazio monodimensionale di autovettori. Se ora consideriamo un'ulteriore osservabile A_{n+1} che commuta con tutte le precedenti, essa deve essere diagonale sulla base degli autostati simultanei di $A_1, A_2, \ldots, A_n$.

Nel caso estremo essa può avere autovalori a_{n+1} tutti distinti, ma tutte distinte sono per costruzione anche le n-uple di autovalori $(a_1, a_2, \ldots, a_n)$, per cui deve necessariamente esistere una relazione funzionale all'interno della $(n+1)$-upla $(a_1, a_2, \ldots, a_{n+1})$. In altri termini, A_{n+1} è una funzione di $A_1, A_2, \ldots, A_n$. Viceversa, se i valori sperimentalmente osservati di A_{n+1} non sono calcolabili con certezza, pur sapendo che il sistema è stato preparato nell'unico stato corrispondente a $(a_1, a_2, \ldots, a_n)$, allora $\Delta A_{n+1} > 0$, tale stato non è autostato di A_{n+1} e quindi A_{n+1} non può commutare con tutte le osservabili precedenti, contrariamente all'ipotesi.

Una volta stabilito quale è lo spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ adatto per la descrizione di un dato sistema fisico $\mathcal{S}$, risultano definiti anche tutti i possibili insiemi completi di osservabili compatibili, nel senso matematico del termine. In generale però, soltanto un numero piuttosto ristretto di tali insiemi possiede una interpretazione operativa reale. Basti pensare che, almeno in linea di principio, esistono molteplici insiemi di osservabili compatibili composti da una sola osservabile. In effetti, essendo per ipotesi $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ separabile, si possono costruire infiniti operatori autoaggiunti dotati di uno spettro discreto composto da autovalori non degeneri: è sufficiente scegliere una base ortonormale arbitraria, gli autovettori, e fissare in modo altrettanto arbitrario una sequenza di numeri reali tutti distinti, da identificare con gli autovalori. Tuttavia, eccezion fatta per sistemi idealizzati particolarmente semplici, si tratta di osservabili solo in senso matematico, poiché risulta praticamente impossibile individuare le corrispondenti osservabili nel senso operativo del termine. Lo stesso vale anche per la maggior parte degli insiemi completi di operatori autoaggiunti.

In generale, il numero di osservabili operativamente identificate di un insieme completo e compatibile dipende, oltre che dalla natura del sistema fisico in esame, anche dalle disponibilità sperimentali. Un esempio tipico è quello dell'elettrone: nei primi anni della meccanica quantistica era convinzione che si trattasse del prototipo del punto materiale quantomeccanico, per il quale le tre componenti della posizione formassero un insieme completo di osservabili compatibili. Tuttavia l'evidenza sperimentale successiva (effetto Zeeman, struttura fine etc.) ha ampiamente dimostrato che il sottospazio corrispondente ad un dato valore di (x, y, z) non è monodimensionale, ma bidimensionale (tale sottospazio va inteso in senso generalizzato, essendo lo spettro della posizione continuo). Per ridurre del tutto la degenerazione è quindi necessaria una ulteriore osservabile, ad esempio la terza componente S_z dell'operatore di **spin** $\mathbf{S}$, che non possiede analogo classico. Come vedremo in seguito, gli autovalori di S_z sono due $s_z = \pm\hbar/2$, e la quadrupla (x, y, z, s_z) individua, in senso generalizzato, un unico stato puro (almeno allo stato attuale della nostra conoscenza sperimentale). Va ricordato, in ogni caso, che lo spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$

si intende ricostruito operativamente, proprio a partire da quello che si ritiene essere, in base all'informazione sperimentale disponibile, un insieme completo di osservabili compatibili (vedi §7.1). Secondo il postulato I questo spazio è unico, sicché ogni altro stato puro preparato mediante un diverso insieme di osservabili compatibili deve essere rappresentato da una combinazione lineare dei precedenti vettori. Davanti ad un esperimento i cui risultati non siano esprimibili attraverso l'identificazione dell'opportuno operatore autoaggiunto sullo spazio $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ così costruito, nonché della regola fondamentale espressa dal postulato III, risulta necessario allargare $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ attraverso una o più nuove osservabili compatibili.

Osservazioni congiunte ed algebra delle osservabili. Secondo la descrizione classica, le osservabili di un sistema fisico, in quanto funzioni a valori reali sul corrispondente spazio delle fasi, formano un'algebra commutativa: se $A = A(q,p)$ e $B = B(q,p)$, allora $A + B$ e AB sono definite nel modo naturale, come moltiplicazioni di numeri reali. In effetti, secondo la meccanica classica tutte le osservabili sono compatibili, e per osservabili compatibili non vi sono problemi nel sommare e moltiplicare fra loro i risultati di diversi esperimenti, mantenendo s'intende la consistenza dimensionale rispetto alle unità di misura scelte. Al contrario, non è per nulla chiaro come definire operativamente le osservabili somma e prodotto di due osservabili A e B tra loro non compatibili: per definizione il sistema $\mathcal{S}$ non può mai trovarsi in uno stato in cui sia A che B assumono ben definiti valori, a e b, che possano essere sommati e moltiplicati per ottenere i valori $a + b$ e ab da assegnare alle osservabili somma e prodotto. Più in generale, non c'è una definizione operativa univoca, in termini di frequenza relativa dei risultati sperimentali, per la distribuzione di probabilità congiunta per due osservabili non compatibili.

D'altra parte, una volta definita tramite il postulato II la rappresentazione matematica delle osservabili in termini di operatori autoaggiunti, risulta possibile manipolare algebricamente gli stessi per ottenere nuovi operatori autoaggiunti. Ad esempio, anche se A e B non commutano, $A + B$ è senz'altro un operatore simmetrico e spesso perfino autoaggiunto, e lo stesso dicasi per $C = f(A) + g(B)$ per opportune funzioni f e g a valori reali. È però evidente che la risoluzione spettrale di C in generale non ha nulla a che vedere con quella di A e di B, se questi non commutano, per cui l'interpretazione probabilistica del postulato III non permette di collegare operativamente l'osservabile rappresentata da C con le osservabili A e B. D'altronde, gli esperimenti atti alla misurazione di C sono in generale completamente diversi da quelli mediante i quali A e/o B vengono misurati.

Dunque la novità sostanziale della rappresentazione matematica delle

osservabili in meccanica quantistica, rispetto alla loro controparte classica, sta nel fatto che esse non formano più un algebra commutativa. Poiché, in generale, gli operatori sullo spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ non commutano (cioè $AB \neq BA$), è chiaro che le relazioni algebriche esistenti tra svariate osservabili al livello classico vanno ora reinterpretate. Abbiamo già incontrato questo problema, nel capitolo precedente, per le generiche funzioni delle coordinate q e dei momenti p. Appare ora chiaro che questo è un fenomeno del tutto generale, proprio della struttura formale della meccanica quantistica.

7.4. Il formalismo delle matrici di densità

Secondo il postulato I, ad ogni stato puro ξ del sistema fisico $\mathcal{S}$ corrisponde un raggio dello spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, ovvero un insieme di vettori normalizzati che differiscono solo per un irrilevante fattore di fase. A sua volta un raggio identifica un preciso sottospazio monodimensionale di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, ovvero una proiezione ortogonale monodimensionale su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ (cioè tale che all'autovalore 1 corrisponde un sottospazio monodimensionale). Dunque ogni stato puro ξ è rappresentato dal proiettore

$$\rho_\xi \equiv |\psi\rangle\langle\psi| \ , \tag{7.19}$$

dove $|\psi\rangle$ è un vettore normalizzato che appartiene al sottospazio monodimensionale corrispondente a ξ. Si dice che $|\psi\rangle$ è un vettore *rappresentativo* del raggio ρ_ξ. Va comunque sottolineato che l'espressione (7.19) non dipende dalla fase di $|\psi\rangle$. A questo punto è chiaro che possiamo far cadere la distinzione tra stati puri in senso operativo e loro rappresentazione matematica, per cui spesso ometteremo il suffisso ξ: gli stati puri del sistema sono i raggi di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, ovvero i proiettori ortogonali monodimensionali su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$.

Anche il postulato III può essere riformulato in termini di proiettori, introducendo l'operazione di **traccia** sugli operatori lineari su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. Se X è un operatore e $\{|n\rangle,\ n = 1, 2, \ldots\}$ una base ortonormale di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, allora gli elementi di matrice di X si scrivono

$$X_{mn} = \langle m|X|n\rangle$$

e la traccia $\mathrm{Tr}\,X$ consiste nella somma degli elementi diagonali

$$\mathrm{Tr}\,X = \sum_n X_{nn} = \sum_n \langle n|X|n\rangle \ . \tag{7.20}$$

Si tratta ovviamente di espressioni formali, dato che generalmente la somma contiene infiniti termini e l'esistenza degli stessi elementi di matrice dipende dal dominio di definizione di X e dalla base scelta. Se $\mathrm{Tr}\,X$ esiste finito, allora X si dice di *classe traccia* e $\mathrm{Tr}\,X$ non dipende dalla base

usata nella definizione (7.20). Inoltre, dati due operatori X e Y, se XY e YX sono di classe traccia, allora

$$\mathrm{Tr}\, XY = \mathrm{Tr}\, YX \,.$$

È evidente che tutti gli stati puri ρ, e più in generale tutti i proiettori finito-dimensionali, sono di classe traccia. Inoltre, se $|\psi\rangle \in \mathcal{D}(X)$, allora

$$\mathrm{Tr}\, \rho X = \mathrm{Tr}\, |\psi\rangle\langle\psi| X = \langle\psi| X |\psi\rangle \;.$$

Nel linguaggio delle tracce e dei proiettori, il postulato III afferma che, se ρ_ξ è lo stato puro del sistema $\mathcal{S}$, allora la probabilità di ottenere, come risultato della misurazione dell'osservabile A, un risultato compreso nel sottoinsieme boreliano $\mathfrak{b}$ vale

$$\mathrm{Pr}_A(\mathfrak{b}|\,\xi) = \mathrm{Tr}\, \rho_\xi\, \hat{E}_A(\mathfrak{b}) \,. \tag{7.21}$$

In particolare la probabilità di transizione (7.14) tra due stati puri ρ_1 e ρ_2 si scrive ora

$$\mathrm{Pr}(\rho_1 \to \rho_2) = \mathrm{Tr}\, \rho_1 \rho_2 = |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2$$

dove l'ultima espressione vale una volta scelti due vettori rappresentativi degli stati puri ρ_1 e ρ_2.

Dobbiamo ora osservare che gli stati puri, in quanto stati sperimentali che raccolgono il massimo di informazione possibile sul sistema, non sono in pratica facilmente preparabili. La situazione più generale è quella in cui l'informazione ottenuta non è massimale, per cui diversi stati puri sono compatibili con i risultati di una data combinazione di esperimenti di prima specie. In questo caso dobbiamo fare ricorso ad una descrizione statistica del sistema, in modo analogo a come in meccanica classica si introduce una distribuzione di probabilità sullo spazio delle fasi. Si parla allora di **miscele statistiche** al posto degli stati puri.

Questa circostanza richiede una modifica minima nel formalismo appena introdotto. Si supponga che, in base all'informazione raccolta, lo stato del sistema possa essere descritto alternativamente dal vettore $|\psi_1\rangle$ con probabilità w_1, oppure da $|\psi_2\rangle$ con probabilità w_2, da $|\psi_3\rangle$ con probabilità w_3, e via dicendo. I vettori $\{|\psi_j\rangle,\ j = 1, 2, \ldots\}$ si intendono linearmente indipendenti, normalizzati, non necessariamente ortogonali e possibilmente infiniti in numero. Inoltre, per definizione di probabilità, avremo che

$$0 \le w_j \le 1 \,, \qquad \sum_j w_j = 1 \,.$$

Possiamo affermare che il sistema si trova con probabilità w_j nello stato puro $\rho_j = |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$. Allora lo stato del sistema è descritto dalla combinazione lineare *convessa*

$$\rho = \sum_j w_j \rho_j = \sum_j |\psi_j\rangle\, w_j \,\langle\psi_j| \ , \tag{7.22}$$

che viene solitamente chiamata **matrice statistica** o **matrice di densità**. Si noti che questa combinazione lineare, con coefficienti nonnegativi, è fatta al livello degli stati ρ_j e non dei vettori di stato $|\psi\rangle_j$. D'altro lato il principio di sovrapposizione lineare afferma che (modulo eventuali regole di superselezione: vedi §7.5) esiste uno stato puro del sistema corrispondente ad una qualunque combinazione lineare

$$|\psi\rangle = \sum_j c_j\, |\psi_j\rangle \ , \tag{7.23}$$

dove i coefficienti c_j, generalmente complessi, sono ristretti solo dalla condizione che $|\psi\rangle$ sia propriamente normalizzato. Questo stato puro si esprime come

$$\begin{aligned}\tilde{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| &= \sum_{ij} |\psi_i\rangle\, \bar{c}_i c_j\, \langle\psi_j| \\ &= \sum_j |c_j|^2 \rho_j + \sum_{i\neq j} |\psi_i\rangle\, \bar{c}_i c_j\, \langle\psi_j|\end{aligned}$$

e certamente non descrive una situazione in cui il sistema si trova in un determinato stato ρ_j con probabilità proporzionale a $|c_j|^2$, anche qualora l'eventuale ortogonalità dei vettori $|\psi_i\rangle$ renda i $|c_j|^2$ propriamente normalizzati e quindi uguali alla probabilità quantomeccanica di *osservare* il sistema nello stato ρ_j. Infatti, a causa dei termini misti con $i \neq j$, che dipendono da tutte le fasi relative fra i vettori $|\psi_i\rangle$, è sempre possibile osservare degli effetti di interferenza in opportuni esperimenti. È proprio la dipendenza dalle fasi relative, completamente assente in (7.22), che segnala la coerenza quantistica dello stato puro $\tilde{\rho}$. Per questa ragione si dice che la combinazione al livello dei vettori di stato (7.23) rappresenta una sovrapposizione **coerente** , mentre la combinazione convessa al livello degli stati (7.22) rappresenta una sovrapposizione **incoerente**.

In ogni caso, sia che il sistema si trovi in uno stato puro oppure in una miscela statistica di stati puri, l'enunciato del postulato III resta invariato (basta omettere la specificazione "puro") e la formula centrale della meccanica quantistica, Eq. (7.21), vale comunque. In particolare, il valore medio dell'osservabile A si scrive

$$\langle A\rangle = \mathrm{Tr}\, \rho A \ , \tag{7.24}$$

ovvero

$$\langle A \rangle = \sum_j w_j \langle A \rangle_j = \sum_j w_j \left\langle \psi_j \middle| A \middle| \psi_j \right\rangle \ .$$

Si noti che l'espressione (7.24) è del tutto generale; infatti, se A coincide con la funzione caratteristica di un'altra osservabile A' su un certo sottoinsieme boreliano, vale a dire con la corrispondente proiezione ortogonale, la (7.24) si riduce alla definizione della probabilità di osservare un valore di A' compreso in quell'intervallo.

Per quanto riguarda la deviazione standard di A nello stato ρ, abbiamo ora

$$(\Delta A)^2 = \mathrm{Tr}\, \rho(\hat{A} - \langle A \rangle)^2 = (\Delta_q A)^2 + (\Delta_{cl} A)^2 \ ,$$

dove

$$\begin{aligned}(\Delta_q A)^2 &= \sum_j w_j (\Delta A)_j^2 \\ &= \sum_j w_j \left\langle \psi_j \middle| (A - \langle A \rangle_j)^2 \middle| \psi_j \right\rangle\end{aligned}$$

è la media delle deviazioni quadratiche di origine puramente quantomeccanica, e quindi rappresenta una misura delle fluttuazioni coerenti dell'osservabile A, mentre

$$(\Delta_{cl} A)^2 = \sum_j w_j (\langle A \rangle_j - \langle A \rangle)^2$$

è la deviazione quadratica dei valori medi $\langle A \rangle_j$, che discende dalla statistica puramente classica e caratterizza perciò le fluttuazioni incoerenti di A.

Così come definita, la matrice di densità gode di tre proprietà fondamentali, che sono

$$\boxed{\rho^\dagger = \rho \ , \quad \rho \geq 0 \ , \quad \mathrm{Tr}\, \rho = 1 \ .} \tag{7.25}$$

La prima segue dal fatto che ρ è una combinazione lineare con coefficienti reali degli operatori autoaggiunti ρ_j. L'unica sottigliezza sta nel fatto che la somma in (7.22) può contenere infiniti termini. Tuttavia, per qualunque vettore $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_S$, applicando la diseguaglianza di Schwarz si ottiene subito

$$\|\rho\phi\|^2 = \sum_{ij} w_i w_j \langle \phi | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \psi_j \rangle \langle \psi_j | \phi \rangle \leq \sum_{ij} w_i w_j \|\phi\|^2 = \|\phi\|^2 \ ,$$

il che dimostra che ρ è un operatore limitato (con norma $\|\rho\| \leq 1$) e quindi rigorosamente autoaggiunto.

La seconda delle proprietà (7.25), e cioè la semipositività di ρ, si verifica immediatamente: il valor medio di ρ in qualunque stato $|\phi\rangle$ è

una somma di termini nonnegativi,

$$\langle\phi|\,\rho\,|\phi\rangle = \sum_j w_j \|\,\langle\phi|\psi_j\rangle\,\|^2$$

Infine la terza proprietà, che afferma la corretta normalizzazione della matrice di densità, si ottiene direttamente dalla formula generale (7.24) ponendo $\hat{A} = \mathbb{1}$.

Essendo autoaggiunto e limitato, l'operatore ρ possiede una base ortonormale di autovettori, $\rho\,|u_n\rangle = p_n\,|u_n\rangle$, dove, a causa delle proprietà (ii) e (iii) deve essere $p_n \geq 0$ e $\sum_n p_n = 1$. In una base di suoi autovettori ρ si scrive in modo formalmente analogo alla definizione originale (7.22)

$$\rho = \sum_n |u_n\rangle\, p_n\, \langle u_n| \ .$$

I proiettori $|u_n\rangle\langle u_n|$ sono però mutuamente ortogonali, per cui

$$\rho^2 = \sum_n |n_n\rangle\, p_n^2\, \langle u_n|$$

da cui appare evidente, essendo p_n compreso fra 0 e 1, che $\rho \geq \rho^2$, con il segno di equaglianza valido se e solo se uno dei numeri p_n vale 1 e tutti gli altri 0, ovvero se e solo se ρ è uno stato puro.

Un modo fisicamente intuitivo di produrre miscele statistiche è il seguente. Supponiamo che il sistema in esame $\mathcal{S}$ si trovi in interazione con un altro sistema $\mathcal{S}'$, per cui lo spazio di Hilbert appropriato per la descrizione del sistema composto $\mathcal{S} \cup \mathcal{S}'$ è il prodotto tensoriale $\mathcal{H}_{\mathcal{S}\cup\mathcal{S}'} = \mathcal{H}_{\mathcal{S}} \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{S}'}$, in accordo con la discussione del §7.1.1. Possiamo anche supporre che lo stato complessivo sia uno stato puro, $|\Psi\rangle\langle\Psi|$, seppure non noto nella sua interezza. La situazione è analoga a quella che si incontra nella descrizione classica: in assenza di sufficienti informazioni, dobbiamo far ricorso ad un approccio statistico basato su una distribuzione di probabilità sullo spazio delle fasi $\mathcal{F}$, ma ciò non toglie che lo specifico sistema fisico in esame occupi un ben preciso punto di $\mathcal{F}$, con ben precisi valori per le $\{q\}$ e le $\{p\}$. Date due basi ortonormali $\{|\phi_j\rangle\}$ e $\{|\phi'_j\rangle\}$, rispettivamente su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ e $\mathcal{H}_{\mathcal{S}'}$, possiamo sempre porre

$$|\Psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij}\, |\phi_i\rangle\, |\phi'_j\rangle \ . \tag{7.26}$$

D'altro lato otteniamo per il valor medio di un'arbitraria osservabile A di $\mathcal{S}$

$$\langle A\rangle = \langle\Psi|\,A\,|\Psi\rangle = \sum_{ij} \langle\phi_i|\,A\,|\phi_j\rangle \sum_k \bar{c}_{ik} c_{jk} \ ,$$

dato che A agisce come l'identità su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}'}$ e la base $\{|\phi'_j\rangle\}$ è per ipotesi ortonormale. Questo risultato si può riscrivere come in (7.24), $\langle A\rangle =$

$\mathrm{Tr}\,\rho A$, identificando come matrice statistica su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$

$$\rho = \sum_{ij} |\phi_i\rangle\, p_{ij}\, \langle\phi_j| \ , \tag{7.27}$$

dove

$$p_{ij} = \sum_k \bar{c}_{jk} c_{ik} \ .$$

PROBLEMA 7.4-4 [] Si verifichi che, così come definito, questo operatore ρ soddisfa le tre propietà (7.25).

Osserviamo dunque che, fintanto che siamo interessati soltanto alle osservabili di $\mathcal{S}$, lo stato puro $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ del sistema composto è equivalente alla miscela statistica ρ per $\mathcal{S}$. Questo effetto è dovuto alla nostra ignoranza, completa e dichiarata, riguardo alla parte $\mathcal{S}'$, sul cui spazio di Hilbert dobbiamo perciò prendere la traccia. Si tratta di una *traccia parziale* $\mathrm{Tr}_{\mathcal{S}'}$ per quanto riguarda lo spazio di Hilbert complessivo $\mathcal{H}_{\mathcal{S}\cup\mathcal{S}'}$:

$$\rho = \mathrm{Tr}_{\mathcal{S}'}\, |\Psi\rangle\langle\Psi| \equiv \sum_j \langle\phi'_j|\Psi\rangle\langle\Psi|\phi'_j\rangle \ .$$

In generale questa operazione non elimina completamente la coerenza quantistica dello stato puro $|\Psi\rangle\langle\Psi|$, che si manifesta attraverso la presenza di termini misti, con $i \neq j$, nell'espressione (7.27). Questo è ovviamente dovuto al fatto che la base $\{|\phi_j\rangle\}$ non è in generale una base di autovettori di ρ. Né si può pensare di poterla scegliere tale a priori, cioè prima di prendere la traccia parziale su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}'}$. Prima infatti non esiste alcuno stato, puro o misto che sia, relativo al solo sistema $\mathcal{S}$, ma solo uno stato puro $|\Psi\rangle$ del sistema complessivo $\mathcal{S}\cup\mathcal{S}'$. Naturalmente, una volta presa la traccia parziale su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}'}$ ed ottenuta la matrice di densità ρ su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, è sempre possibile diagonalizzarla e porla nella forma (7.22). I coefficienti p_{jj} dei termini diagonali in (7.27), che sono per costruzione nonnegativi e propriamente normalizzati, $\sum_j p_{jj} = \sum_{ij} |c_{ij}|^2 = 1$, prendono il nome di **popolazioni** degli stati puri $|\phi_j\rangle\langle\phi_j|$, mentre i coefficienti p_{ij}, $i \neq j$, dei termini misti prendono il nome di **coerenze residue**. Si noti che la diseguaglianza di Schwarz implica che $|p_{ij}|^2 \leq p_{ii}p_{jj}$, per cui $p_{ii} = 0$ implica $p_{ij} = 0$ per tutti i j, cioè stati non popolati non possono dar luogo a fenomeni di interferenza con alcun altro stato. Un esempio su questa materia verrà discusso nel §7.7.3.

7.4.1. Il teorema di Gleason. A questo punto risulta naturale domandarsi se le matrici di densità su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ forniscono la rappresentazione matematica più generale possibile della nozione di stato così come discussa dal punto di vista operativo al §7.1. La risposta risulta essere affermativa, grazie all'importante teorema di Gleason, che ora illustreremo (senza dimostrazione). Innanzitutto occorre ricordare la definizione

di stato presentata al §7.1: uno stato ξ del sistema fisico $\mathcal{S}$ consiste nell'assegnazione, per ciascuna osservabile A del sistema, di una misura di probabilità $\mathrm{Pr}_A(\mathfrak{b}|\xi)$ sulla retta reale $\mathbb{R}$, misura che per definizione deve soddisfare ai requisiti (7.1) e (7.2). Questa definizione può essere riformulata in modo equivalente in termini delle funzioni caratteristiche $E_A(\mathfrak{b})$ dei sottoinsiemi boreliani di $\mathbb{R}$: ξ associa ad ogni $E = E_A(\mathfrak{b})$ un numero reale $\langle E\rangle_\xi$ con le proprietà (si noti che $E_A(\varnothing) = 0$ e $E_A(\mathbb{R}) = 1$, $\forall A$)

$$0 \le \langle E\rangle_\xi \le 1\,, \qquad \langle 0\rangle_\xi = 0\,, \qquad \langle 1\rangle_\xi = 1 \tag{7.28}$$

e, non appena E e E' hanno supporto disgiunto,

$$\langle E + E'\rangle = \langle E\rangle + \langle E'\rangle\ . \tag{7.29}$$

Ricordiamo ora che, secondo il postulato II, le osservabili sono rappresentate da operatori autoaggiunti su $\mathcal{H}_\mathcal{S}$, ovvero che ad ogni funzione caratteristica $E = E_A(\mathfrak{b})$ (cioè ad ogni esperimento di tipo "si o no") corrisponde una proiezione spettrale[6] $\hat{E}$ su un qualche sottospazio di $\mathcal{H}_\mathcal{S}$. Dunque la rappresentazione matematica di uno stato ξ deve essere un funzionale a valori reali $\langle\cdot\rangle_\xi$ sull'insieme di tutte le proiezioni ortogonali su $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ con le proprietà equivalenti alle (7.28) e (7.30), vale a dire

$$0 \le \langle\hat{E}\rangle_\xi \le 1\,, \qquad \langle 0\rangle_\xi = 0\,, \qquad \langle \mathbb{1}\rangle_\xi = 1 \tag{7.30}$$

e, non appena $\hat{E}$ e $\hat{E}'$ sono ortogonali,

$$\langle\hat{E} + \hat{E}'\rangle = \langle\hat{E}\rangle + \langle\hat{E}'\rangle\ . \tag{7.31}$$

Il teorema di Gleason afferma che, se $\dim \mathcal{H}_\mathcal{S} > 2$, allora esiste una ed una sola matrice di densità ρ_ξ, con le proprietà (7.25) tale che

$$\langle\hat{E}\rangle_\xi = \mathrm{Tr}\,\rho_\xi\hat{E}$$

per qualunque proiezione ortogonale $\hat{E}$ in $\mathcal{H}_\mathcal{S}$. In sostanza, se si tiene conto che gli stati puri sono particolari matrici di densità, questo teorema dimostra che la struttura logica della meccanica quantistica è piuttosto rigida: una volta assunti i postulati I e II, l'unico modo per estrarre dalla teoria le probabilità da confrontare con gli esperimenti è tramite il postulato III. Possiamo dunque affermare che i postulati I, II e III non sono logicamente indipendenti.

[6] Per maggior chiarezza conviene momentaneamente reintrodurre la notazione che distingue mediante il cappuccio l'operatore autoaggiunto $\hat{A}$ dall'osservabile A che esso rappresenta.

7.5. Regole di superselezione

Nell'introduzione al postulato I abbiamo osservato che il principio di sovrapposizione lineare va incondizionatamente applicato in assenza di evidenza sperimentale in senso contrario. Questa precisazione è necessaria dato che in natura sono effettivamente osservate delle restrizioni al principio di sovrapposizione, che prendono il nome di **regole di superselezione**. Esse corrispondono all'accertata impossibilità (almeno sino ad ora) di identificare le osservabili la cui misurazione di prima specie permetta di preparare determinati tipi di stati puri. Ad esempio, non è attualmente noto come preparare stati puri descritti da combinazioni lineari di vettori di stato con diversi autovalori della carica elettrica. Quindi, se è vero che un insieme completo di osservabili compatibili permette, attraverso il principio di sovrapposizione lineare, di ricostruire lo spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, non è sempre vero che il corrispondente spazio dei raggi $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}/\mathbb{C}^*$ rappresenti esattamente l'insieme di tutti gli stati puri di $\mathcal{S}$. Per essere vero, è necessario che per qualunque raggio di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ si possa identificare un insieme completo di osservabili compatibili misurando le quali sia possibile preparare il corrispondente stato puro di $\mathcal{S}$. L'esperienza sperimentale indica invece che esistono determinate osservabili $Q_1, Q_2, \ldots$, dotate di spettro discreto, che sono compatibili con tutte le osservabili di $\mathcal{S}$ e quindi fanno parte di tutti gli insiemi completi di osservabili compatibili fisicamente realizzabili. In altri termini ogni stato puro di $\mathcal{S}$ è un autostato di queste osservabili, che prendono il nome di *cariche di superselezione*, e non esistono stati puri in cui esse non abbiano un valore definito. Ne segue che combinazioni lineari di vettori corrispondenti ad autovalori differenti di $Q_1, Q_2, \ldots$ non descrivono stati puri di $\mathcal{S}$, dato che la loro preparazione sarebbe possibile solo tramite osservabili che non commutano con le cariche di superselezione.

La struttura fisicamente corretta dello spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ risulta allora essere la seguente: $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ è suddiviso in *settori di superselezione* $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}^{(q_1,q_2,\ldots)}$ caratterizzati dai diversi autovalori $q_1, q_2, \ldots$ delle cariche Q_1, Q_2, ... Mentre all'interno di ciascun settore il principio di sovrapposizione lineare vale in maniera incondizionata, esso non vale tra differenti settori: se $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ appartengono a due diversi settori, allora $|\psi\rangle = c_1|\psi\rangle + c_2|\psi_2\rangle$ non descrive alcun nuovo stato puro del sistema $\mathcal{S}$. Infatti i settori di superselezione non sono tra loro comunicanti, nel senso che non esistono osservabili con elementi di matrice non-nulli tra differenti settori: $\langle\psi_1|A|\psi_2\rangle = 0$, per qualsiasi osservabile A (ovviamente esistono molteplici operatori autoaggiunti con tali elementi di matrice non-nulli, ma essi non corrispondono ad alcuna osservabile nel senso operativo del termine). Quindi il valor medio di A, nell'ipotetico stato puro descritto

da $|\psi\rangle = c_1 |\psi\rangle + c_2 |\psi_2\rangle$, vale (si assumano i vettori normalizzati)

$$\langle\psi| A |\psi\rangle = |c_1|^2 \langle\psi_1| A |\psi_2\rangle + |c_2|^2 \langle\psi_2| A |\psi_2\rangle \ ,$$

cioè lo stesso che nello stato misto $\rho = |c_1|^2 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |c_1|^2 |\psi_2\rangle\langle\psi_2|$. Quindi $|\psi\rangle\langle\psi|$ non è fisicamente distinguibile da ρ e non corrisponde ad un nuovo stato puro di $\mathcal{S}$. In base a questa osservazione, concludiamo che diversi settori di superselezione possono essere combinati solo incoerentemente, ovvero secondo i principi della statistica classica. Per contro, all'interno di ciascun settore di superselezione $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}^{(q_1,q_2,\dots)}$ il principio di sovrapposizione lineare continua a valere in modo incondizionato, determinando la tipica coerenza quantomeccanica degli stati puri.

7.6. Rappresentazioni e trasformazioni

7.6.1. Funzioni d'onda. Abbiamo precedentemente visto come, dato un insieme completo di osservabili compatibili, $A_1, A_2, \ldots, A_n$, i corrispondenti autovalori $a_1, a_2, \ldots, a_n$ servano come indici per una base ortonormale dello spazio di Hilbert $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ (eventualmente intesa in senso generalizzato). Per abbreviare la notazione, indichiamo sinteticamente con *l'indice generalizzato* α l'intera collezione $a_1, a_2, \ldots, a_n$, e corrispondentemente con $|\alpha\rangle$ un generico vettore della suddetta base ortonormale. L'ortonormalità della base $\{|\alpha\rangle\}$ si scrive allora

$$\langle\alpha|\,\alpha'\rangle = \delta_{\alpha\,\alpha'} \ ,$$

dove il simbolo $\delta_{\alpha\,\alpha'}$ può contenere anche δ di Dirac. La completezza di $\{|\alpha\rangle\}$ si esprime attraverso la cosiddetta **risoluzione completa dell'identità** associata alle osservabili $A_1, A_2, \ldots, A_n$:

$$\mathbb{1} = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| \ ,$$

dove le sommatorie vanno intese, se necessario, anche come integrali.

Un generico vettore $|\psi\rangle$ di $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ viene ora espresso come una combinazione lineare dei vettori (vettori generalizzati) $|\alpha\rangle$,

$$|\psi\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\,\psi \ .$$

I coefficienti $\langle\alpha|\psi\rangle$ di questo sviluppo costituiscono la **funzione d'onda** $\psi(\alpha)$ dello stato puro descritto da $|\psi\rangle$ nella **rappresentazione** di $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ basata sull'insieme completo $A_1, A_2, \ldots, A_n$. Esplicitamente

$$\psi(\alpha) = \psi(a_1, a_2, \ldots, a_n) = \langle\alpha|\psi\rangle \ .$$

Si noti che le funzioni d'onda risultano univocamente definite solo se le fasi relative dei vettori $|\alpha\rangle$ sono state fissate una volta per tutte. In particolare, se soltanto l'insieme $A_1, A_2, \ldots, A_n$ è sotto osservazione, la scelta delle fasi relative è del tutto arbitraria: una ridefinizione del tipo

$$|\alpha\rangle \longrightarrow e^{i\theta_\alpha}\,|\alpha\rangle$$

determina evidentemente la trasformazione

$$\psi(\alpha) \longrightarrow e^{-i\theta_\alpha}\psi(\alpha) \tag{7.32}$$

per le funzioni d'onda.

Secondo il postulato III, assumendo $|\psi\rangle$ propriamente normalizzato, $|\langle\alpha|\psi\rangle|^2$ rappresenta la probabilità che, trovandosi il sistema $\mathcal{S}$ in uno stato puro descritto da $|\psi\rangle$, la misurazione contemporanea delle osservabili $A_1, A_2, \ldots, A_n$ dia $a_1, a_2, \ldots, a_n$ come risultato (naturalmente questa probabilità va intesa come densità di probabilità nel caso di spettri continui). Dunque $\psi(\alpha)$ rappresenta una *ampiezza di probabilità*, ovvero un

numero complesso il cui modulo quadrato è una (densità di) probabilità. In particolare la corretta normalizzazione richiede che

$$\sum_{\alpha} |\psi(\alpha)|^2 = 1 \ .$$

Nell'uso pratico i concetti di vettori di stato e funzioni d'onda sono intercambiabili. Non va dimenticato tuttavia che mentre quella di vettore di stato è una nozione astratta, quella di funzione d'onda richiede una concreta rappresentazione dello spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ basata su un determinato insieme completo di osservabili compatibili.

Data una tale rappresentazione, possiamo realizzare esplicitamente anche tutti gli operatori lineari su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, e quindi tutte le osservabili. In effetti, un generico operatore X risulta univocamente determinato dai suoi elementi di matrice in una qualunque base. Nel caso della base ortonormale $\{|\alpha\rangle\}$ questi si scrivono $\langle\alpha|X|\alpha'\rangle$ e l'azione di X sulle funzioni d'onda è data da

$$\begin{aligned}(X\psi)(\alpha) \equiv \langle\alpha|X|\psi\rangle &= \sum_{\alpha'} \langle\alpha|X|\alpha'\rangle \langle\alpha'|\psi\rangle \\ &= \sum_{\alpha'} \langle\alpha|X|\alpha'\rangle \psi(\alpha') \ .\end{aligned}$$

In particolare, l'azione di una qualunque funzione delle osservabili $A_1, A_2, \ldots, A_n$ che definiscono la rappresentazione risulta essere *puramente moltiplicativa*, cioè

$$(f(A_1, A_2, \ldots, A_n)\psi)(\alpha) = f(\alpha)\psi(\alpha)$$

Per l'ipotesi di completezza dell'insieme $\{A_1, A_2, \ldots, A_n\}$, le funzioni $f(A_1, A_2, \ldots, A_n)$ sono le sole *osservabili diagonali* (cioè con azione puramente moltiplicativa) nella rappresentazione $\{|\alpha\rangle\}$.

7.6.2. Cambiamenti di base. Supponiamo ora che gli operatori $B_1, B_2, \ldots, B_m$, per ipotesi non tutti esprimibili come funzioni di $A_1, A_2, \ldots, A_n$, formino un altro insieme completo di osservabili compatibili. In corrispondenza ad essi possiamo quindi considerare un'altra rappresentazione dello spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, ovvero un'altra base ortonormale $\{|\beta\rangle\} = \{|b_1, b_2, \ldots, b_m\rangle, \ b_j \in \sigma(B_j)\}$ di autovettori, con le relative espressioni per l'ortogonalità e la completezza

$$\langle\beta|\beta'\rangle = \delta_{\beta\,\beta'} \ , \qquad \sum_{\beta} |\beta\rangle\langle\beta| = \mathbb{1} \ .$$

Sviluppando un generico vettore nella nuova base

$$|\psi\rangle = \sum_{\beta} |\beta\rangle\langle\beta|\psi\rangle$$

ed utilizzando la completezza della prima base $\{|\alpha\rangle\}$, otteniamo

$$\langle\beta|\psi\rangle = \sum_\alpha \langle\beta|\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle \ , \tag{7.33}$$

cioè la *legge di trasformazione* fra le funzioni d'onda $\tilde{\psi}(\beta) = \langle\beta|\psi\rangle$ e $\psi(\alpha) = \langle\alpha|\psi\rangle$ delle due rappresentazioni. Si noti che mentre il vettore $|\psi\rangle$ è lo stesso, le forme funzionali delle due funzioni d'onda sono generalmente diverse e vanno perciò indicate con simboli diversi. I prodotti scalari $\langle\beta|\alpha\rangle$ si possono identificare come gli elementi di una matrice $U = \{U_{\beta\alpha}\}$ che per costruzione è **unitaria**, $UU^\dagger = U^\dagger U = 1$, (dove $(U^\dagger)_{\beta\alpha} = \bar{U}_{\alpha\beta} = \langle\beta|\alpha\rangle$) dato che

$$\sum_\alpha \langle\beta|\alpha\rangle\langle\alpha|\beta'\rangle = \langle\beta|\beta'\rangle = \delta_{\beta\beta'}$$
$$\sum_\beta \langle\alpha|\beta\rangle\langle\beta|\alpha'\rangle = \langle\alpha|\alpha'\rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \ .$$

Viceversa, dato un operatore U *unitario* su $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ (cioè un operatore lineare che conserva il prodotto scalare: $\langle U\psi|U\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle$, $\forall\psi, \phi \in \mathcal{H}_\mathcal{S}$), ad esso corrisponde un cambiamento di base, da una base ortonormale $\{|\alpha\rangle\}$ alla base, pure ortonormale, $\{U|\alpha\rangle\}$. Si noti che se $\{|\alpha\rangle\}$ è una base in senso generalizzato, l'operazione $|\alpha\rangle \to U|\alpha\rangle$ va opportunamente definita. Il risultato, in ogni caso, è ancora una base generalizzata. Se invece $\{|\alpha\rangle\}$ è una base in senso stretto, e quindi per definizione numerabile, allora anche la nuova base $\{U|\alpha\rangle\}$ lo è. Tra le due basi, comunque, esiste una corrispondenza biunivoca, per cui la trasformazione generata da U ammette sia una interpretazione *attiva* che una *passiva*. Secondo la visione attiva cambia il vettore mentre le componenti, che definiscono la funzione d'onda, restano invariate:

$$|\psi\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\psi \longrightarrow U|\psi\rangle = \sum_\alpha U|\alpha\rangle\langle\alpha|\psi \ .$$

Secondo quella passiva il vettore resta inalterato e cambia la funzione d'onda al cambiare della base

$$\psi(\alpha) = \langle\alpha|\psi\rangle \longrightarrow \langle\alpha|U^\dagger|\psi\rangle = (U^{-1}\psi)(\alpha) \ .$$

D'altra parte, la funzione d'onda del vettore attivamente trasformato vale

$$\langle\alpha|U|\psi\rangle = (U\psi)(\alpha) \ ,$$

per cui le due visioni comportano un'azione opposta (o *controgradiente* l'una dell'altra) al livello di funzioni d'onda. Il formalismo dei *bra* e dei *ket* risulta particolarmente efficace nell'evidenziare questa distinzione, poiché se $|\psi\rangle \to U|\psi\rangle$ allora $\langle\psi| \to \langle\psi|U^\dagger$.

La domanda che sorge spontanea è se tutte le trasformazioni che ammettono entrambe le interpretazioni, sia attiva che passiva, siano rappresentate da un operatore unitario. Ciò che conta, affinché entrambe le interpretazioni siano possibili, è che tra le due basi $\{|\alpha\rangle\}$ e $\{|\beta\rangle\}$ sia possibile stabilire una corrispondenza uno-a-uno. In tal caso, ad ogni $|\alpha\rangle$ possiamo far corrispondere un particolare elemento $|\beta_\alpha\rangle$ della nuova base $\{|\beta\rangle\}$, e quindi definire un operatore lineare U mediante la relazione

$$|\beta_\alpha\rangle = U|\alpha\rangle \ . \tag{7.34}$$

Tale operatore manda vettori ortonormali in vettori ortonormali e, una volta esteso per linearità a tutto $\mathcal{H}_\mathcal{S}$, risulta unitario. Tuttavia questa conclusione non è la più generale possibile, dato che la linearità di U non è una condizione manifestamente necessaria. Dopo tutto, ciò che è veramente misurabile è soltanto il modulo quadrato $|\langle\alpha|\beta\rangle|^2$ del prodotto scalare tra gli elementi delle due basi ortonormali. Quindi l'operatore U avrebbe elementi di matrice nella base $\{|\alpha\rangle\}$, $U_{\alpha\alpha'} = \langle\beta_\alpha|\alpha'\rangle$, dei quali soltanto il modulo, e non la fase, è effettivamente osservabile. Il principio di sovrapposizione lineare risulta perciò preservato dal cambio di rappresentazione, tra quella generata da $A_1, A_2, \ldots, A_n$ e quella generata da $B_1, B_2, \ldots, B_m$, estendendo all'intero $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ la corrispondenza $|\alpha\rangle \to |\beta_\alpha\rangle$, sia linearmente che *antilinearmente*. Nel primo caso abbiamo

$$\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\psi \longrightarrow \sum_\alpha |\beta_\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle \ ,$$

mentre nel secondo vale

$$\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\psi \longrightarrow \sum_\alpha |\beta_\alpha\rangle\langle\psi|\alpha\rangle \ . \tag{7.35}$$

Nel primo caso risulta definito dalla (7.34) un operatore unitario U, mentre nel secondo U è **antiunitario**. È facile convincersi che un operatore antiunitario U si può sempre scrivere come prodotto VK di un operatore unitario V per un fissato operatore antiunitario K: ad esempio, dalla relazione (7.35) risulta evidente che K può essere individuato nell'operatore di *coniugazione complessa relativo alla base* $\{|\alpha\rangle\}$:

$$K|\psi\rangle = K\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\psi = \sum_\alpha |\alpha\rangle\,\overline{\langle\alpha|\psi\rangle} \ .$$

Secondo un importante teorema, dovuto a Wigner, le due possibilità appena citate sono esaurienti. Anticipiamo qui la formulazione più generale, che è fatta in termini di trasformazioni di simmetria, e sarà ampiamente trattata nel cap. 9:

(a) *Definizione*: una **trasformazione di simmetria** T è una corrispondenza biunivoca dello spazio proiettivo dei raggi di $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ in

se stesso che rispetta le eventuali regole di superselezione e preserva i moduli dei prodotti scalari, ovvero la struttura metrica di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}/\mathbb{C}^*$.

(b) *Teorema* (Wigner): Ogni trasformazione di simmetria T è rappresentabile mediante un operatore unitario o antiunitario U_T sullo spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. U_T risulta univocamente definito a meno di un fattore di fase.

Si noti che in questa formulazione generale non viene fatto esplicito riferimento a cambiamenti di rappresentazione. In pratica, però, tutte le trasformazioni di simmetria fisicamente rilevanti sono associate a corrispondenze biunivoche, operativamente realizzabili, tra le osservabili di $\mathcal{S}$: dato un insieme completo di osservabili compatibili $A_1, A_2, \ldots, A_n$ esiste una precisa legge (intesa innanzitutto come sequenza di operazioni realizzabili in laboratorio), che permette di costruire a partire da esso un nuovo insieme $A'_1, A'_2, \ldots, A'_n$, con la suddetta trasformazione di simmetria fissata dall'interpretazione attiva del corrispondente cambio di rappresentazione. Tipicamente, le leggi in questione sono definite dalle simmetrie fondamentali della natura, quali la simmetria per traslazione, per rotazione, per inversione spaziale etc. Di esse ci occuperemo in dettaglio nel cap. 9.

Quanto detto sinora per i vettori di stato può essere ripetuto per gli operatori: per stabilire la legge di trasformazione di un operatore X è sufficiente inserire, negli elementi di matrice di X nella nuova base $\{|\beta\rangle\}$, due completezze scritte in termini della vecchia base $\{|\alpha\rangle\}$

$$\langle\beta|X|\beta'\rangle = \sum_{\alpha}\sum_{\alpha'} \langle\beta|\alpha\rangle\langle\alpha|X|\alpha'\rangle\langle\alpha'|\beta'\rangle \ . \tag{7.36}$$

È bene sottolineare che, a questo livello, si tratta soltanto di un cambiamento di rappresentazione: l'operatore X resta invariato e cambiano solo i suoi elementi di matrice, cioè la trasformazione è intesa in senso passivo. Naturalmente, nel caso in cui esista una corrispondenza biunivoca tra i vettori delle due basi $\{|\alpha\rangle\}$ e $\{|\beta\rangle\}$, anche l'interpretazione attiva è possibile e, come abbiamo appena visto, sullo spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ risulta definita una trasformazione di simmetria, implementata da un operatore unitario o antiunitario U. In tal caso anche gli operatori possono essere attivamente trasformati secondo la regola

$$X \longrightarrow X' = U^\dagger X U \ .$$

Per costruzione X' è quell'operatore che possiede nella vecchia base $\{|\alpha\rangle\}$ gli stessi elementi di matrice (per U unitario), o i coniugati complessi degli elementi di matrice (per U antiunitario) che possiede X nella nuova base $\{|\beta\rangle\} = \{U|\alpha\rangle\}$.

7.6.3. Rappresentazioni della posizione e del momento. Grazie alla nozione di rappresentazione, possiamo ora riprodurre, all'interno della struttura generale della meccanica quantistica, il formalismo della meccanica ondulatoria presentato nel precedente capitolo. Consideriamo inizialmente, per semplicità, il caso di un punto materiale quantomeccanico (o "particella") costretto a muoversi in una dimensione. Si tratta dunque del sistema fisico $\mathcal{S}$ interamente specificato da una singola osservabile, la *posizione* q, la quale possiede per ipotesi l'intera retta reale $\mathbb{R}$ come spettro. Evidentemente q è una osservabile continua, per cui è necessaria una certa cautela nel parlare dei corrispondenti autovalori ed autostati. Come già più volte sottolineato, possiamo considerare q come idealmente ottenuta nel limite infinito di procedure sperimentali necessariamente finite, e quindi in grado di fornire solo risultati discreti. Un modo fisicamente molto intuitivo di procedere è quello di considerare una partizione della retta reale in intervalli contigui, di ampiezza costante o variabile, ma comunque non nulla, ed approssimare q con la posizione discreta, il cui spettro coincide con gli interi che indicizzano i suddetti intervalli. Per essere concreti, consideriamo intervalli di ampiezza costante a, per cui $\mathbb{R}$ viene approssimato dal reticolo ordinato monodimensionale di intervalli $(na - a/2, na + a/2)$, con n appartenente all'insieme $\mathbb{Z}$ degli interi relativi. Lo stato $|n\rangle\langle n|$ descrive la situazione in cui la particella è stata localizzata nell'intervallo n-esimo, ed è un autostato della versione discreta dell'osservabile q che rappresenta la posizione nel reticolo. Il corrispondente operatore autoaggiunto si scrive quindi

$$q = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |n\rangle\, na\, \langle n| \ .$$

Secondo i principi della meccanica quantistica, al variare di n l'insieme dei vettori $|n\rangle$ forma una base ortonormale dello spazio di Hilbert dei vettori di stato

$$\langle n|n\rangle' = \delta_{n\,n'} \ , \qquad \sum_{n=-\infty}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \mathbb{1} \ , \tag{7.37}$$

con le fasi relative tra i vettori $|n\rangle$ fissate secondo una determinata regola da specificarsi (ogni cambiamento di queste fasi lascia evidentemente invariato l'operatore fondamentale q, ma definisce una nuova rappresentazione, collegata alla precedente da una trasformazione unitaria diagonale: le fasi relative vanno fissate per precisare completamente la rappresentazione). Si noti che in questo caso $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ viene ricostruito direttamente nella rappresentazione della posizione. Ogni vettore $|\psi\rangle$ si esprime come

sovrapposizione lineare dei vettori $|n\rangle$,

$$|\psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |n\rangle\langle n|\psi\rangle \ ,$$

dove $\psi_n \equiv \langle n|\psi\rangle$ è la corrispondente funzione d'onda. La condizione di normalizzabilità

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 < \infty$$

ed il prodotto scalare

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \bar{\phi}_n \psi_n$$

mostrano che $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ coincide con ℓ_2, lo spazio di Hilbert delle serie a quadrato sommabile.

Per recuperare la descrizione della particella sulla retta reale, dobbiamo considerare il cosiddetto "limite continuo", nel quale $a \to 0$. Per esempio, possiamo considerare una successione di reticoli congruenti ottenuti per dimezzamento ripetuto del passo reticolare: $a \to a/2$, per cui dopo s dimezzamenti avremo $a = 2^{-s}a_0$, con a_0 il passo reticolare iniziale. Nelle misure di lunghezza di ogni giorno la base è 10 anziché 2, ma il concetto è lo stesso. Il limite $s \to \infty$ costituisce in ogni caso una idealizzazione, dato il potere risolutivo necessariamente finito di ogni strumento di misura. D'altro lato tale limite rende possibile una descrizione "universale" del moto quantomeccanico della particella, cioè una descrizione svincolata dalla particolare discretizzazione scelta, e quindi anche dalle apparecchiature sperimentali effettivamente a disposizione.

Nel limite continuo la posizione q acquista uno spettro continuo dato che, ponendo $x = na$, ogni fissato valore di x viene approssimato arbitrariamente bene se $a \to 0$ e $n \to \infty$. Per quanto riguarda il limite dello spazio di Hilbert, si consideri il prodotto scalare:

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a\overline{(a^{-1/2}\phi_n)}(a^{-1/2}\psi_n) \ .$$

Con le sostituzioni (piuttosto formali ma intuitivamente ovvie)

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} a \ldots \longrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dx \ldots \ , \quad a^{-1/2}\psi_n \longrightarrow \psi(x) \equiv \langle x|\psi\rangle \ ,$$

otteniamo

$$\langle\phi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\phi(x)}\psi(x)$$

e cioè l'espressione del prodotto scalare in $\mathcal{L}_2(\mathbb{R})$. Per concludere rigorosamente che $\mathcal{L}_2(\mathbb{R})$ è proprio il limite continuo di ℓ_2 dovremmo verificare che la misura sulla retta reale ottenuta quando $a \to 0$ è proprio quella di Lebesgue. Questo esula però dai nostri scopi, per cui ci limiteremo

a considerazioni formali. In ogni caso, l'affermazione che $\ell_2 \to \mathcal{L}_2(\mathbb{R})$ equivale ad affermare che il generico vettore normalizzabile $|\psi\rangle$ possiede un limite per $a \to 0$, senza bisogno di moltiplicarlo per potenze di a. In altri termini, $|\psi\rangle$ è adimensionale. Ma poiché abbiamo appena visto che la funzione d'onda richiede un fattore dimensionale $a^{-1/2}$, dobbiamo concludere che tale fattore va assegnato agli autovettori della posizione:

$$a^{-1/2}\psi_n = \left(a^{-1/2}\langle n|\right)|\psi\rangle \longrightarrow \langle x|\psi\rangle \ ,$$

ovvero

$$a^{-1/2}|n\rangle \longrightarrow |x\rangle \ .$$

Questo spiega perché $|x\rangle$ non è normalizzabile. Ad esempio, dalla relazione di ortogonalità della base $\{|n\rangle\}$, ponendo $x = na$ e $x' = n'a$, si ottiene

$$\langle x|x'\rangle \simeq a^{-1}\langle n|n'\rangle = a^{-1}\delta_{nn'} \longrightarrow \delta(x - x') \ ,$$

dove possiamo riguardare l'ultimo passaggio come una definizione formale della delta di Dirac.

È immediato estendere questa trattazione al caso di una particella libera di muoversi in D dimensioni. Le osservabili di posizione sono le D componenti $q_1, q_2, \ldots, q_n$ del vettore di posizione $\mathbf{q}$, che possiede quindi come spettro lo spazio $\mathbb{R}^D$. Quest'ultimo viene inizialmente sostituito dal reticolo cubico D-dimensionale $a\mathbb{Z}^D$ formato da celle di lato a. Ogni cella è individuata da una D-upla $\mathbf{n} = (n_1, n_2, \ldots, n_D) \in \mathbb{Z}^D$ di interi relativi, cui corrisponde un vettore $|\mathbf{n}\rangle$ che descrive lo stato nel quale la particella è localizzata nella suddetta cella[7]. Con la notazione vettoriale che abbiamo adottato, la versione D-dimensionale delle relazioni di ortonormalità e completezza (7.37) si scrive in modo quasi identico

$$\langle \mathbf{n}|\mathbf{n}'\rangle = \delta^{(D)}_{nn'} \ , \qquad \sum_{n\in\mathbb{Z}^D} |\mathbf{n}\rangle\langle\mathbf{n}| = \mathbb{1} \ ,$$

dove $\delta^{(D)}_{nn'} = \prod_{j=1}^{D} \delta_{n_j n'_j}$. Le versioni D-dimensionali delle altre relazioni sono ovvie per cui eviteremo di riportarle, eccetto che per la relazione tra le funzioni d'onda ψ_n sul reticolo e quelle del continuo, $\psi(\mathbf{x})$ e la relazione di ortonormalità della base generalizzata $\{|\mathbf{x}\rangle\}$. L'osservazione

[7] Una realizzazione fisica in $D = 3$ di questa modellizzazione matematica è fornita da una camera a filo. Per tale esempio il limite continuo descrive la situazione fisicamente impossibile di una camera a filo infinitamente fitta. Ma non è per una camera a filo reale che dobbiamo considerare il limite continuo, bensì per una camera a filo immaginaria da riguardare come modellizzazione astratta (ed oltre certi limiti arbitraria) dello spazio fisico. Ovviamente un'apparecchiatura immaginaria non ci permette di fare delle osservazioni reali. D'altro canto, le osservazioni reali delle piccolissime distanze, condotte con l'ausilio degli acceleratori di particelle (ed interpretate alla luce della teoria quantistica dei campi), dimostrano che se lo spazio è un reticolo ipercubico, il passo reticolare a è molto più piccolo delle scale atomiche e subatomiche. Quindi, per la descrizione quantomeccanica di singole particelle, il limite $a \to 0$ è più che ragionevole.

fondamentale è la seguente: $|\psi(\mathbf{x})|^2$ rappresenta una densità di probabilità, per cui $\psi(\mathbf{x})$ deve avere le stesse dimensioni di $x^{-D/2}$. Quindi avremo

$$a^{-D/2}\psi_{\mathbf{n}} \longrightarrow \psi(\mathbf{x})$$

e, corrispondentemente,

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle \simeq a^{-D}\,\langle \mathbf{n}|\mathbf{n}'\rangle = a^{-D}\delta^{(D)}_{\mathbf{n}\,\mathbf{n}'} \longrightarrow \delta^{(D)}(x-x')\,. \tag{7.38}$$

Osserviamo ora che lo spettro della posizione continua $\mathbf{q}$, ovvero $\mathbb{R}^D$, possiede un'evidente simmetria sotto *traslazioni*. Queste ultime sono le trasformazioni di $\mathbb{R}^D$ in se stesso definite da

$$T(\mathbf{u}) : \mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{x}+\mathbf{u}\,, \quad \mathbf{u}\in\mathbb{R}^D\,. \tag{7.39}$$

Il reticolo $a\mathbb{Z}^D$ non è invariante sotto una generica traslazione $T(\mathbf{u})$, a meno che $\mathbf{u}$ non sia esso stesso un vettore di $a\mathbb{Z}^D$, ovvero $\mathbf{u} = \mathbf{r}a$, $r\in\mathbb{Z}^D$. In tal caso

$$T(\mathbf{r}a) : \mathbf{n} \longrightarrow \mathbf{n}+\mathbf{r}\,, \quad r\in\mathbb{Z}^D\,. \tag{7.40}$$

Le traslazioni $\mathfrak{T}^D = \{T(\mathbf{u}), u\in\mathbb{R}^D\}$ formano un gruppo abeliano (vedi l'App. B.1) con legge di composizione

$$T(\mathbf{u})\,T(\mathbf{u}') = T(\mathbf{u}+\mathbf{u}')\,. \tag{7.41}$$

Lo stesso dicasi per il sottogruppo $\mathfrak{T}^D_a$ delle traslazioni discrete $\{T(\mathbf{r}a), \mathbf{r}\in\mathbb{Z}^D\}$

$$T(\mathbf{r}a)\,T(\mathbf{r}'a) = T((\mathbf{r}+\mathbf{r}')a)\,. \tag{7.42}$$

La notazione $\mathfrak{T}^D$ o $\mathfrak{T}^D_a$ rende conto del fatto che, una volta espresso il vettore $\mathbf{u}$ come combinazione lineare dei versori coordinati $\mathbf{e}_1 = (1,0,\ldots,0)$, $\mathbf{e}_2 = (0,1,\ldots,0),\ldots\mathbf{e}_D = (0,0,\ldots,1)$, vale a dire $\mathbf{u} = \sum_{j=1}^D u_j\mathbf{e}_j$, ogni traslazione si scrive come prodotto di traslazioni lungo gli assi coordinati

$$T(\mathbf{u}) = T(u_1\mathbf{e}_1)\,T(u_2\mathbf{e}_2)\,\ldots\,T(u_D\mathbf{e}_D)\,.$$

È inoltre evidente che $\mathfrak{T}^D$ come insieme coincide con lo spazio originale $\mathbb{R}^D$: la notazione $\mathfrak{T}^D$ rende solo esplicita la struttura gruppale delle D-uple di numeri reali sotto addizione. Lo stesso discorso vale per $\mathfrak{T}^D_a$ e le D-uple di interi relativi. In particolare si noti che ogni traslazione discreta $T(\mathbf{r}a)$ in una qualsiasi delle direzioni coordinate si ottiene come potenza r-esima della traslazione di un passo reticolare a in quella direzione: se $\mathbf{r} = (r,0,\ldots,0)$, allora $T(\mathbf{r}a) = [T(a\mathbf{e}_1)]^r$. Il caso più semplice è quello monodimensionale $D = 1$, per il quale la notazione vettoriale è sovrabbondante: per ogni $r\in\mathbb{Z}$, $T(ra) = T(a)^r$, dove $T(a)$ è la traslazione di un passo reticolare verso destra.

L'azione di $\mathfrak{T}^D$ su $\mathbb{R}^D$ o di $\mathfrak{T}^D_a$ su $a\mathbb{Z}^D$ si estende naturalmente ad un'azione sulle osservabili di posizione $\mathbf{q}$

$$\mathsf{T}(\mathbf{u}) : \mathbf{q} \longrightarrow \mathbf{q} + \mathbf{u} \tag{7.43}$$

e l'equivalenza tra le osservabili originarie e quelle trasformate si traduce in una relazione di simmetria per i rispettivi spazi di Hilbert. Ad esempio $\mathsf{T}(\mathbf{r}a)$ agisce in modo ovvio su uno stato localizzato nella cella $\mathbf{n}$-esima:

$$\mathsf{T}(\mathbf{r}a) : |\mathbf{n}\rangle\langle\mathbf{n}| \longrightarrow |\mathsf{T}(\mathbf{r}a)\mathbf{n}\rangle\langle\mathsf{T}(\mathbf{r}a)\mathbf{n}| = |\mathbf{n}+\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{n}+\mathbf{r}| \tag{7.44}$$

e lascia senz'altro invariate le relazioni di ortonormalità della base $\{|\mathbf{n}\rangle\}$:

$$\langle\mathsf{T}(\mathbf{r}a)\mathbf{n}|\mathsf{T}(\mathbf{r}a)\mathbf{n}'\rangle = \langle\mathbf{n}+\mathbf{r}|\mathbf{n}'+\mathbf{r}\rangle = \delta^{(D)}_{\mathbf{n}+\mathbf{r}\,\mathbf{n}'+\mathbf{r}} = \delta^{(D)}_{\mathbf{n}\,\mathbf{n}'} = \langle\mathbf{n}|\mathbf{n}'\rangle \ .$$

Analoghe relazioni esistono nella versione continua, con gli stati idealizzati $|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|$ e le traslazioni continue $\mathsf{T}(\mathbf{u})$.

In accordo con il teorema di Wigner, $\mathsf{T}(\mathbf{u})$ è rappresentata da un operatore unitario $\hat{\mathsf{T}}(\mathbf{u})$ (il caso antiunitario è escluso perché le traslazioni di $\mathbb{R}^D$ sono connesse in modo continuo alla trasformazione identica T_0, cui possiamo sempre associare l'operatore $\mathbb{1}$, che è unitario). Dalla relazione (7.44) e dal fatto che sia $|\mathbf{x}\rangle$ che $\hat{\mathsf{T}}(\mathbf{u})$ sono comunque individuati solo a meno di un fattore di fase, ricaviamo

$$|\mathsf{T}(\mathbf{u})\mathbf{x}\rangle = \hat{\mathsf{T}}(\mathbf{u})\,|\mathbf{x}\rangle = \zeta(\mathbf{x},\mathbf{u})\,|\mathbf{x}+\mathbf{u}\rangle \ , \tag{7.45}$$

dove $|\zeta(\mathbf{x},\mathbf{u})| = 1$ (l'azione di $\hat{\mathsf{T}}(\mathbf{u})$ si estende poi a tutto $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ per linearità). Analogamente, la legge di composizione delle traslazioni, Eq. (7.41) si traduce per gli operatori $\hat{\mathsf{T}}(\mathbf{u})$ nella relazione

$$\hat{\mathsf{T}}(\mathbf{u})\,\hat{\mathsf{T}}(\mathbf{u}') = \omega(\mathbf{u},\mathbf{u}')\hat{\mathsf{T}}(\mathbf{u}+\mathbf{u}') \ , \tag{7.46}$$

dove $\omega(\mathbf{u},\mathbf{u}')$ è un altro fattore di fase. Si dice che $\hat{\mathfrak{T}}^D = \{\hat{\mathsf{T}}(\mathbf{u}),\, \mathbf{u} \in \mathbb{R}^D\}$ costituisce una **rappresentazione per raggi** o **rappresentazione proiettiva** del gruppo di simmetria $\mathfrak{T}^D$ caratterizzata dai fattori $\omega(\mathbf{u},\mathbf{u}')$ (vedi cap. 9 e App. B.1). Per quanto riguarda la fase globale degli operatori $\hat{\mathsf{T}}_u$, essa è fissata dalla naturale richiesta $\hat{\mathsf{T}}_0 = \mathbb{1}$. Si noti che nessun problema di fasi esiste nell'azione di $\hat{\mathsf{T}}(\mathbf{u})$ sulle osservabili: alla relazione (7.43) corrisponde la relazione operatoriale

$$\hat{\mathsf{T}}(\mathbf{u})^\dagger\, \mathbf{q}\, \hat{\mathsf{T}}(\mathbf{u}) = \mathbf{q} + \mathbf{u} \ , \tag{7.47}$$

come si deduce facilmente dalla richiesta che le osservabili trasformate abbiano valori medi opportunamente traslati in stati non trasformati.

Nel cap. 9 tratteremo in generale il problema delle rappresentazioni proiettive di gruppi di simmetria in meccanica quantistica, ed in particolare del gruppo delle traslazioni. Per il momento ci limitiamo a considerare

la più semplice realizzazione degli operatori $\hat{T}(\mathbf{u})$, definita costruttivamente dalla loro azione sulla base $\{|\mathbf{x}\rangle\}$

$$\hat{T}(\mathbf{u})\,|\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x}+\mathbf{u}\rangle \tag{7.48}$$

Questo implica immediatamente

$$\hat{T}(\mathbf{u})\hat{T}(\mathbf{u}') = \hat{T}(\mathbf{u}+\mathbf{u}')\,.$$

Dunque gli operatori $\hat{T}(\mathbf{u})$ soddisfano alla stessa legge di composizione delle traslazioni astratte e forniscono perciò una **rappresentazione vettoriale** o **rappresentazione in senso stretto** delle stesse. Si intende che analoghe relazioni esistono per le traslazioni discrete $T(\mathbf{r}a)$ e per i vettori di stato $|\mathbf{n}\rangle$. D'ora in poi per brevità indicheremo una traslazione e l'operatore che la rappresenta con lo stesso simbolo $T(\mathbf{u})$ (con $\mathbf{u} = \mathbf{r}a$ per traslazioni discrete).

Come già affermato, una volta definita sugli elementi di base, l'azione di $T(\mathbf{u})$ si estende per linearità a tutto $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. In particolare possiamo facilmente calcolare come $T(\mathbf{u})$ agisce su una arbitraria funzione d'onda $\psi(\mathbf{x})$: dato che $T(\mathbf{u})^\dagger = T(\mathbf{u})^{-1} = T(-\mathbf{u})$, abbiamo

$$\begin{aligned} T(\mathbf{u}) \,:\, \psi(\mathbf{x}) \longrightarrow (T(\mathbf{u})\psi)(\mathbf{x}) &= \langle\mathbf{x}|\,T(\mathbf{u})\,|\psi\rangle \\ &= \langle T(-\mathbf{u})\mathbf{x}|\psi\rangle \\ &= \psi(\mathbf{x}-\mathbf{u})\,. \end{aligned} \tag{7.49}$$

Ritornando momentaneamente sul reticolo monodimensionale $a\mathbb{Z}$, osserviamo che l'operatore $T(a)$ è facilmente diagonalizzabile. Infatti, per ogni numero complesso k i vettori

$$|k\rangle \propto \sum_{n\in\mathbb{Z}} \exp(ikna)\,|n\rangle$$

sono formalmente autovettori di $T(a)$, con autovalore e^{ika}, e quindi di tutti i $T(ra)$, con autovalore e^{ikra}. Tuttavia $|k\rangle$ esplode esponenzialmente in una delle due direzioni a meno che k non sia reale, nel qual caso $|\langle n|k\rangle|$ è costante. Gli stati $|k\rangle$ con k reale sono detti **onde piane**, ed evidentemente non sono normalizzabili. Essi vanno intesi come vettori di stato in senso generalizzato. Si osservi anche che k e $k+2\pi q/a$ definiscono lo stesso vettore per ogni $q \in \mathbb{Z}$, per cui possiamo restringere il numero d'onda k alla cosiddetta **prima zona di Brillouin**, vale a dire

$$k \in (-\pi/a, \pi/a]\,. \tag{7.50}$$

La scelta fatta è convenzionale: ad esempio $[0, 2\pi/a)$ o $(k_0, 2\pi/a + k_0]$ vanno altrettanto bene.

L'estensione al caso D-dimensionale è immediata: grazie alla definizione (7.48), gli operatori $T(\mathbf{r}a)$ commutano e sono diagonali simultaneamente sulle onde piane

$$T(\mathbf{r}a)\,|\mathbf{k}\rangle = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}a)\,|\mathbf{k}\rangle\ ,\ \ |\mathbf{k}\rangle \propto \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^D} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}a)\,|\mathbf{n}\rangle\ , \tag{7.51}$$

dove $\mathbf{k}\cdot\mathbf{n} \equiv \sum_{j=1}^{D} k_j n_j$. Esse sono indicizzate dai numeri d'onda $\mathbf{k} = (k_1, k_2, \ldots, k_D)$ che restringiamo convenzionalmente alla prima zona di Brillouin: $k_j \in (-\pi/a, \pi/a]$.

La non normalizzabilità delle onde piane $|\mathbf{k}\rangle$ è ancora una volta dovuta ad un processo di limite. In nessun esperimento reale è possibile tenere sotto osservazione, alla ricerca della particella, una porzione infinita di spazio. Una qualunque apparecchiatura sperimentale possiede una estensione necessariamente finita, per cui possiamo immaginarla immersa in una regione Λ grande, ma finita dello spazio, imponendo che la particella si trovi senz'altro da qualche parte in Λ. Se le dimensioni di questa regione sono abbastaza grandi, non potremo mai effettuare esperimenti in grado di distinguere questa situazione da quella in cui lo spazio accessibile alla particella è a priori infinito. Questo ci permette anche di scegliere la forma di Λ e le condizioni al contorno nel modo più conveniente. La scelta tipica è quella di un ipercubo di lato L, con condizioni periodiche al contorno, per cui lati opposti dell'ipercubo sono identificati. Il vantaggio di questa scelta sta nel mantenimento della simmetria per traslazione. Il processo di limite sopracitato consiste nel considerare $L \to \infty$ e prende comunemente il nome di limite **infrarosso** (il limite continuo viene chiamato anche limite **ultravioletto**), per ragioni che saranno presto chiare.

Se a è diverso da zero, ovvero prima del limite continuo, la regione Λ è ancora suddivisa in celle, per cui lo spazio fisico risulta di fatto identificato con un reticolo ipercubico D-dimensionale, finito e periodico. Assumendo che L sia un multiplo dispari di a, $L = (2N+1)a$, restringeremo ogni componente n_j di $\mathbf{n}$ di modo che $-N \le n_j \le N$. Il numero totale di celle è evidentemente $(2N+1)^D = (L/a)^D$: questo è il numero dei vettori della base ortonormale $\{|\mathbf{n}\rangle\}$ e coincide quindi con la dimensionalità dello spazio di Hilbert. Dunque in presenza del *cutoff* ultravioletto a e del *cutoff* infrarosso L, $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ è finito-dimensionale ed isomorfo a $\mathbb{C}^{(2N+1)^D}$.

Le traslazioni discrete $T(\mathbf{r}a)$ trasformano ancora il reticolo Λ in se stesso, ma necessariamente

$$T(\mathbf{r}L) = \mathbb{1}\,, \quad \forall \mathbf{r} \in \mathbb{Z}^D\ , \tag{7.52}$$

visto che una traslazione di L/a passi reticolari in una qualunque direzione coordinata riporta ogni cella in se stessa. Ad esempio, nel caso

monodimensionale $D = 1$, dove la relazione $T(ra) = T(a)^r$ rende sufficiente considerare l'azione di $T(a)$, su stati localizzati non sul bordo destro avremo

$$T(a)\,|n\rangle = |n+1\rangle\ , \quad -N \le n \le N-1\ , \tag{7.53}$$

mentre per lo stato localizzato sul bordo destro dovrà valere

$$T(a)\,|N\rangle = |-N\rangle\ . \tag{7.54}$$

Questa ultima relazione potrebbe sembrare non abbastanza generale, tenendo conto della natura intrinsecamente proiettiva delle rappresentazioni in meccanica quantistica: l'Eq. (7.52) vale per le traslazioni del reticolo periodico, mentre per gli operatori unitari che le rappresentano nello spazio di Hilbert varrà in generale la forma proiettiva della stessa, che per $D = 1$ si scrive $T(rL) = \omega\mathbb{1}$, $|\omega| = 1$. Di conseguenza l'Eq. (7.54) va modificata nella

$$T(a)\,|N\rangle = \omega\,|-N\rangle\ . \tag{7.55}$$

Analoghe relazioni varranno per ciascuno dei D sottogruppi di $\mathfrak{T}^D$ corrispondenti alle traslazioni nelle direzioni coordinate, per cui nella versione proiettiva dell'Eq. (7.52) compaiono D fattori di fase $\omega_j = e^{i\lambda_j}$, $0 \le \lambda_j < 2\pi$:

$$T(\mathbf{r}L) = \exp(i\boldsymbol{\lambda}\cdot\mathbf{r})\mathbb{1} \tag{7.56}$$

Rimandando ai prossimi capitoli la trattazione di esempi rilevanti di rappresentazioni proiettive delle traslazioni su varietà non semplicemente connesse, come è il dominio periodico Λ, consideriamo qui solo il caso proiettivamente banale $\omega_j = 1$. Questa scelta rientra nella nostra libertà di approssimare nel modo più semplice possibile lo spazio fisico infinito con una regione Λ finita. In particolare, la relazione $T(\mathbf{r}L) = \mathbb{1}$ implica per l'azione degli operatori di traslazione sui vettori $|\mathbf{n}\rangle$ e sulle componenti q_j della posizione

$$T(\mathbf{r}a)\,|\mathbf{n}\rangle = |\mathbf{n}'\rangle\ , \quad n'_j = n_j + r_j \mod 2N+1$$
$$T(\mathbf{r}a)\,q_j\,T(\mathbf{r}a) = q_j + ra \mod L\ .$$

Infine la relazione (7.52) per gli operatori $T(\mathbf{r}a)$ si traduce nel seguente vincolo per i loro autovalori

$$\exp(iL\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) = 1\ ,$$

il che forza $\mathbf{k}$ ad essere reale e della forma

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}\boldsymbol{\nu}\ ,$$

dove i ν_j, $j = 1, 2, \ldots, D$ sono interi, che possiamo sempre scegliere secondo la regola simmetrica $-N \le \nu_j \le N$.

Le onde piane, cioè gli autovettori di $T(\mathbf{r}a)$, sono normalizzate dal fattore $(2N+1)^{-D/2} = (a/L)^{D/2}$

$$|\mathbf{k}\rangle = (a/L)^{D/2} \sum_{\mathbf{n}\in\Lambda} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}a)\,|\mathbf{n}\rangle \ .$$

Esse formano una base ortonormale

$$\langle \mathbf{k}|\,\mathbf{k}'\rangle = \delta^{(D)}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \ , \tag{7.57}$$

per via della ben nota proprietà delle radici ennesime dell'unità:

$$\sum_{n=-N}^{N} \exp\frac{2i\pi\nu n}{2N+1} = (2N+1)\delta_{\nu 0} \ .$$

Nella relazione (7.57) appare una delta di Kronecker in termini dei numeri discreti ma non interi k_j piuttosto che degli interi ν_j, ma il significato è lo stesso: essa vale 1 se $k_j = k'_j$ e 0 altrimenti.

Dunque la diagonalizzazione delle traslazioni ci fornisce una nuova base $\{|\mathbf{k}\rangle\}$ ortonormale, ovvero definisce un cambio di rappresentazione, che prende il nome di *trasformazione di Fourier discreta*. La nuova base $\{|\boldsymbol{\nu}\rangle\}$ descrive evidentemente stati completamente delocalizzati, nei quali la particella si trova con la stessa probabilità $(a/L)^{D/2}$ in qualunque cella. L'ortogonalità tra due diversi stati di questo tipo è dovuta alle diverse fasi dell'*ampiezza* di probabilità di osservare la particella in una data cella. Tale ampiezza coincide con la matrice unitaria che definisce la trasformazione, vale a dire con la funzione d'onda di un'onda piana: $\langle \mathbf{n}|\,\mathbf{k}\rangle = (a/L)^{D/2}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}a)$.

La relazione tra le funzioni d'onda nelle due rappresentazioni si scrive, in accordo con la regola generale (7.33)

$$\tilde{\psi}_{\mathbf{k}} = (a/L)^{D/2} \sum_{\mathbf{n}\in\Lambda} \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}a)\psi_{\mathbf{n}} \ . \tag{7.58}$$

Com'è noto, $\tilde{\psi}_{\mathbf{k}}$ prende il nome di trasformata di Fourier di $\psi_{\mathbf{n}}$. La relazione inversa (che esprime l'antitrasformata di Fourier $\psi_{\mathbf{n}}$ in termini di $\tilde{\psi}_{\mathbf{k}}$) si scriverà quindi

$$\psi_{\mathbf{n}} = (a/L)^{D/2} \sum_{\mathbf{k}\in\tilde{\Lambda}} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}a)\tilde{\psi}_{\mathbf{k}} \tag{7.59}$$

dove $\tilde{\Lambda}$ rappresenta il reticolo duale di Λ, ovvero la prima zona di Brillouin: nel nostro caso, cioè quello di un reticolo ipercubico, abbiamo semplicemente $\tilde{\Lambda} = (2\pi/L)\Lambda$[8]. Infine, data l'unitarietà della trasformazione

[8] La trasformazione di Fourier discreta è definita in generale per ogni reticolo ordinato, dato che si basa sull'esistenza di un gruppo transitivo di simmetria (non necessariamente un gruppo abeliano di traslazioni, vedi l'App. B.1).

di Fourier, abbiamo

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{n}\in\Lambda} \langle\psi|\mathbf{n}\rangle\langle\mathbf{n}|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{k}\in\tilde{\Lambda}} \langle\psi|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\psi\rangle \ ,$$

per cui vale la relazione di Plancherel tra $\psi_{\mathbf{n}}$ e $\tilde{\psi}_{\mathbf{k}}$,

$$\sum_{\mathbf{n}\in\Lambda} |\psi_{\mathbf{n}}|^2 = \sum_{\mathbf{k}\in\tilde{\Lambda}} |\tilde{\psi}_{\mathbf{k}}|^2 \ . \tag{7.60}$$

Nel limite infrarosso $L \to \infty$ (con a fissato), per ottenere un risultato diverso da zero è necessario moltiplicare $|\mathbf{k}\rangle$ per $L^{D/2}$, ovvero ridefinire $|\mathbf{k}\rangle$:

$$|\mathbf{k}\rangle \longrightarrow L^{-D/2}|\mathbf{k}\rangle \ , \tag{7.61}$$

per cui (si confronti con la versione non normalizzata (7.51))

$$|\mathbf{k}\rangle = a^{D/2} \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^D} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}a)\,|\mathbf{n}\rangle \ .$$

Il riscalamento (7.61) evidenzia il fatto che le onde piane non sono normalizzabili su un reticolo infinito. Nel limite $L \to \infty$ il reticolo duale $\tilde{\Lambda}$ diventa infinitamente fitto e viene a coincidere con il dominio precedentemente introdotto $\{(-\pi/a, \pi/a]\}^D$ (vedi Eq. (7.50)).

I vettori $\{|\mathbf{k}\rangle\}$ continuano comunque a formare una base ortonormale in senso generalizzato:

$$\langle\mathbf{k}|\mathbf{k}'\rangle \simeq (L/a)^D \delta^{(D)}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \longrightarrow (2\pi)^D \delta^{(D)}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \ .$$

La delta di Dirac $\delta^{(D)}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ così (formalmente) definita risulta correttamente normalizzata dato che

$$\begin{aligned}
\int_{\tilde{\Lambda}} d^D k\, \langle\mathbf{k}|\mathbf{k}'\rangle &= \int_{\tilde{\Lambda}} d^D k \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^D} \langle\mathbf{k}|\mathbf{n}\rangle\langle\mathbf{n}|\mathbf{k}'\rangle \\
&= a^D \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^D} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{n}a} \int_{\tilde{\Lambda}} d^D k\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}a} \\
&= a^D \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^D} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{n}a} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^D \delta^{(D)}_{\mathbf{n}\,0} = (2\pi)^D \ .
\end{aligned} \tag{7.62}$$

Esaminiamo ora gli effetti del limite infrarosso sulla trasformazione di Fourier: in accordo con la ridefinizione (7.61), poniamo $\tilde{\psi}_{\mathbf{k}} = (a/L)^{D/2}\tilde{\psi}(\mathbf{k})$, ottenendo così per l'antitrasformata di Fourier (vedi Eq. (7.59))

$$\begin{aligned}
\psi_{\mathbf{n}} &= \frac{a^{D/2}}{(2\pi)^D} \sum_{\mathbf{k}\in\tilde{\Lambda}} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^D \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}a)\tilde{\psi}(\mathbf{k}) \\
&\longrightarrow a^{D/2} \int_{\tilde{\Lambda}} \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}a)\tilde{\psi}(\mathbf{k}) \ ,
\end{aligned} \tag{7.63}$$

con la naturale identificazione di $2\pi/L$, la distanza tra due valori contigui di k_j, con l'elemento infinitesimo dk_j. Analogamente, per la trasformata di Fourier abbiamo ora

$$\tilde{\psi}(\mathbf{k}) = a^{D/2} \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^D} \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}a)\psi_{\mathbf{n}} \,, \tag{7.64}$$

cioè lo sviluppo della funzione $\tilde{\psi}(\mathbf{k})$ in serie multipla di Fourier. Infine la relazione di Plancherel (7.60) diventa

$$\sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^D} |\psi_{\mathbf{n}}|^2 = \int_{\tilde{\Lambda}} \frac{d^D k}{(2\pi)^D} |\tilde{\psi}(\mathbf{k})|^2 \,, \tag{7.65}$$

dove si ricordi che $\tilde{\Lambda} = \{(-\pi/a, \pi/a]\}^D$. Quest'ultima relazione evidenzia l'isomorfismo tra $\ell_2(\mathbb{Z}^D)$, lo spazio delle serie con D indici a modulo quadro sommabile e $\mathcal{L}_2(\tilde{\Lambda})$, lo spazio delle funzioni a modulo quadro integrabile su $\{(-\pi/a, \pi/a]\}^D$ (a loro volta, questi due spazi di Hilbert sono isomorfi rispettivamente a $\ell_2(\mathbb{Z})^{\otimes D}$ e $\mathcal{L}_2(\mathbb{R})^{\otimes D}$). Dal punto di vista fisico stiamo parlando dello stesso spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$: i due spazi di cui sopra corrispondono a due diverse rappresentazioni di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$.

Ritorniamo ora sul reticolo finito Λ e consideriamo il limite continuo $a \to 0$ con L fissato. In questo limite è Λ stesso che diventa infinitamente fitto e la variabile $\mathbf{x} = \mathbf{n}a$ diventa continua, ovvero $\Lambda \to (-L/2, L/2]^D$. Anche le traslazioni sono ora continue, ma non va dimenticato che la periodicità di Λ implica che esse agiscono mod L sugli stati localizzati e sulle componenti della posizione. D'altro lato, le traslazioni sono diagonali

$$T(\mathbf{u})\,|\mathbf{k}\rangle = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{u})\,|\mathbf{k}\rangle$$

sulle onde piane, che descrivono stati completamente delocalizzati.

Con la regola precedentemente trovata, $\psi_{\mathbf{n}} = a^{D/2}\psi(\mathbf{x})$, dalle relazioni (7.58), (7.59) e (7.60) proprie della trasformazione di Fourier discreta, otteniamo

$$\tilde{\psi}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{L^{D/2}} \int_{\Lambda} d^D x \, \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})\, \psi(\mathbf{x}) \,, \tag{7.66}$$

mentre, tenuto conto che $N = \frac{1}{2}(L/a - 1) \to \infty$, per cui deve valere ($x \in \mathbb{R}$),

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{L^{D/2}} \sum_{\mathbf{k}\in(2\pi/L)\mathbb{Z}^D} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})\, \tilde{\psi}_{\mathbf{k}} \,. \tag{7.67}$$

Infine

$$\int_{\Lambda} d^D x \, |\psi(\mathbf{x})|^2 = \sum_{\mathbf{k}\in\tilde{\Lambda}} |\tilde{\psi}_{\mathbf{k}}|^2 \,. \tag{7.68}$$

La dualità tra queste ultime relazioni e le relazioni (7.66), (7.67) e (7.68) è manifesta. Nel limite infrarosso $L \to \infty$ con a fissato, lo spazio delle

configurazioni (inteso come spettro delle osservabili di posizione $\mathbf{q}$) diventa illimitato ma resta discreto, mentre lo spazio dei numeri d'onda k diventa continuo ma resta limitato. Quindi possiamo considerare onde piane con lunghezze d'onda arbitrariamente grandi, tutte multiple però di una lunghezza d'onda minima pari a $2a$. Nel limite ultravioletto $a \to 0$ con L finito, vale esattamente il contrario: esistono lunghezze d'onda comunque piccole, ottenute dividendo la lunghezza d'onda massima pari a L (il caso dell'onda piana con $\mathbf{k} = 0$, ovvero la funzione d'onda costante, va considerato a parte). Evidentemente questo spiega le due denominazioni, infrarosso ed ultravioletto, comunemente adottate per i due limiti. In entrambi i casi comunque, nella rappresentazione definita da una base discreta lo spazio di Hilbert è realizzato come ℓ_2, mentre nella rappresentazione con base (generalizzata) continua esso è realizzato come un $\mathcal{L}_2(\mathcal{D})$, dove $\mathcal{D}$ è uno dei due ipercubi Λ o $\tilde{\Lambda}$ su cui sono definite le funzioni d'onda $\psi(\mathbf{x})$ o $\tilde{\psi}(\mathbf{k})$.

Come già precedentemente affermato, le traslazioni formano un gruppo abeliano a D parametri, con legge di composizione $T(\mathbf{u})\,T(\mathbf{u}') = T(\mathbf{u}+\mathbf{u}')$. In particolare, per ogni fissato vettore non-nullo $\mathbf{u}$, possiamo considerare il *sottogruppo ad un parametro* formato dagli elementi della forma $g(s) = T(s\mathbf{u})$, con s arbitrario numero reale. Ad esempio, se $\mathbf{u}$ è un versore, $u^2 \equiv \sum_j u_j^2 = 1$, $g(s)$ individua una traslazione di una distanza $|s|$ nella direzione $\mathbf{u}s/|s|$. Evidentemente $g(s) + g(s') = g(s+s')$ e $g(-s) = g(s)^{-1} = g(s)^\dagger$, per cui $G = \{g(s),\, s \in \mathbb{R}\}$ costituisce un *gruppo ad un parametro di operatori unitari* sullo spazio di Hilbert $\mathcal{H}_\mathcal{S}$. Si tratta di un gruppo di operatori *continuo in senso forte* (cioè, per ogni s, $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_\mathcal{S}$ e $\epsilon > 0$, esiste un intorno I di s tale che $\|(U(s') - U(s))\psi\| < \epsilon$ per ogni $s' \in I$). Un importante teorema, dovuto a Stone [**BRS93**], afferma in questo caso che l'operatore X definito da

$$X|\psi\rangle = \lim_{s\to 0} \frac{i}{s}\,[g(s) - 1]\,|\psi\rangle \tag{7.69}$$

su ogni vettore $|\psi\rangle$ per il quale il suddetto limite esiste in senso forte, è autoaggiunto e genera il gruppo G, cioè $g(s) = \exp(-isX)$. Quest'ultima relazione risulta evidente se si pensa alla continuità di G, alla sua legge di composizione e alla definizione (7.69) con $|\psi\rangle$ rimpiazzato da $g(s')\,|\psi\rangle$. Infine, tenendo conto della dipendenza delle traslazioni $g(s) = T(s\mathbf{u})$ dal vettore $\mathbf{u}$ e della legge di composizione generale $T(\mathbf{u})\,T(\mathbf{u}') = T(\mathbf{u}+\mathbf{u}')$, è immediato concludere che l'operatore X dipende linearmente da $\mathbf{u}$ (basta scegliere successivamente come $\mathbf{u}$ i versori coordinati). Possiamo quindi porre $X = \mathbf{u}\cdot\mathbf{p}/\hbar$, dove i D operatori $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \ldots, p_D)$ sono autoaggiunti, hanno le dimensioni del momento lineare e generano le

traslazioni:

$$T(\mathbf{u}) = \exp(-i\mathbf{u}\cdot\mathbf{p}/\hbar)\ . \tag{7.70}$$

In meccanica classica il momento lineare è la funzione generatrice delle traslazioni, intese come trasformazioni canoniche. Risulta allora naturale identificare $\mathbf{p}$ con (l'operatore autoaggiunto che rappresenta) il vettore momento lineare della particella. Componendo le relazioni (7.47) e (7.70) si ottiene, tenendo conto della periodicità di Λ,

$$e^{-i\mathbf{u}\cdot\mathbf{p}/\hbar}\, q_j\, e^{i\mathbf{u}\cdot\mathbf{p}/\hbar} = q_j + u_j \mod L \tag{7.71}$$

che per $\mathbf{u}$ infinitesimo (nel qual caso la limitazione mod L non si applica) si scrive

$$(1 + i\mathbf{u}\cdot\mathbf{p}/\hbar)\, q_j\, (1 - i\mathbf{u}\cdot\mathbf{p}/\hbar) = q_j + u_j\ ,$$

ovvero

$$\left[q_j\,, p_{j'}\right] = i\hbar\delta_{jj'}\ , \tag{7.72}$$

che sono le regole di commutazione canoniche tra posizione e momento. Si noti che queste relazioni esprimono un risultato locale, indipendente dalle condizioni al contorno di periodicità. Queste si fanno sentire soltanto al momento di esponenziarle per passare dall'Eq. (7.72) all'Eq. (7.71). Se tale esponenziazione è definita tramite serie di potenze, si ottiene a prima vista una contraddizione con la (7.71), dato che nessuna limitazione mod L sembra apparire. In realtà la definizione di $T(\mathbf{u}) = \exp(-i\mathbf{u}\cdot\mathbf{p}/\hbar)$ per serie di potenze è ovviamente limitata ai vettori di stato analitici, mentre proprio su tali vettori il commutatore $\left[q_j\,, p_{j'}\right]$ non è affatto definito. Per convincersene basta considerare l'espressione esplicita di $\mathbf{q}$ e $\mathbf{p}$ nella rappresentazione della posizione. Per costruzione $(q_j\psi)(\mathbf{x}) = x_j\psi(\mathbf{x})$, mentre per ottenere la rappresentazione di $\mathbf{p}$ basta considerare l'analoga relazione (7.49) per $T(\mathbf{u})$. Confrontandola con la definizione (7.69) si ottiene

$$\frac{1}{\hbar}\mathbf{u}\cdot(\mathbf{p}\psi)(\mathbf{x}) = \lim_{s\to 0}\frac{i}{s}\left[\psi(\mathbf{x} - s\mathbf{u}) - \psi(\mathbf{x})\right]\ ,$$

vale a dire

$$p_j\psi = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x_j}\ ,$$

che è l'identificazione fondamentale della meccanica ondulatoria. Il dominio di definizione di $\mathbf{p}$ consiste evidentemente in tutte le funzioni su Λ che ammettono derivate parziali in $\mathcal{L}_2(\Lambda)$. Si noti che la periodicità di Λ non va assolutamente dimenticata; Λ non ha alcun bordo e tutti i suoi punti sono equivalenti. Ad esempio, nel caso $D = 1$, la scrittura esplicita $\Lambda = (-L/2, L/2]$ è da considerarsi equivalente alla $\Lambda = (x_0, x_0 + L]$ o $\Lambda = [x_0, x_0 + L)$, dove x_0 è un numero arbitrario. In $D = 1$ Λ può essere visualizzato come un cerchio di raggio $L/2\pi$, in D dimensioni, come

prodotto cartesiano di D copie dello stesso. La derivate parziali sono le componenti del gradiente su tale spazio, il quale tratta tutti i punti allo stesso modo. Ne segue che se ψ è analitica in $\mathbf{x}$, essa appartiene al dominio di definizione delle serie di potenze di p_j, ma $x_j\psi$ in generale non vi appartiene e quindi il commutatore $[p_j, x_j]$ non risulta definito su tutto il dominio di funzioni d'onda sul quale vale l'esponenziazione del momento per serie di potenze. Questa sottigliezza naturalmente viene meno nel limite infrarosso $L \to \infty$.

Nella rappresentazione in cui $T(\mathbf{u})$ è diagonale anche $\mathbf{p}$ è diagonale, per cui

$$\mathbf{p}\,|\mathbf{k}\rangle = \hbar k\,|\mathbf{k}\rangle \ , \quad (\mathbf{p}\tilde{\psi})(\mathbf{k}) = \hbar \mathbf{k}\,\tilde{\psi}(\mathbf{k}) \ .$$

Quindi, in presenza del *cutoff* infrarosso L, lo spettro del momento coincide con $(2\pi/L)\mathbb{Z}^D$. In definitiva, possiamo identificare il momento lineare $\mathbf{p}$ con l'insieme completo di osservabili compatibili che definisce la rappresentazione in cui le traslazioni sono diagonali. Tale rappresentazione prende quindi il nome di **rappresentazione del momento**. Questa terminologia viene comunemente adottata anche sul reticolo (finito od infinito che sia), cioè in presenza del *cutoff* ultravioletto a. In tal caso possiamo definire $\mathbf{p}$ mediante la relazione

$$T(\mathbf{r}a) = \exp(-ia\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}/\hbar) \tag{7.73}$$

e la regola che lo spettro di $\mathbf{p}/\hbar$ coincida con la prima zona di Brillouin $\tilde{\Lambda}$ (per la quale la scelta più opportuna, in vista del limite continuo, è proprio quella simmetrica fin qui adottata, cioè $\tilde{\Lambda} = \{(-\pi/a, \pi/a]\}^D$). La differenza fondamentale rispetto al caso continuo è che l'operatore autoaggiunto $\mathbf{p}$ così definito non è locale nella rappresentazione della posizione. Infatti, mentre nel caso continuo p_j ha elementi di matrice locali

$$\langle \mathbf{x}|\, p_j\, |\mathbf{x}'\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}\delta^{(D)}(x - x') \ ,$$

sul reticolo finito Λ abbiamo (l'esercizio è lasciato al lettore)

$$\langle \mathbf{n}|\, p_j\, |\mathbf{n}'\rangle = \frac{\hbar}{2N+1}\sum_{\mathbf{k}\in\tilde{\Lambda}} k_j \exp[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{n}-\mathbf{n}')a] = p(n_j - n_j')\prod_{\substack{m=1\\ m\neq j}}^{D} \delta_{n_m n_m'} \ ,$$

dove $p(0) = 0$ mentre, per $n \neq 0$,

$$p(n) = \frac{(-1)^n \pi\hbar}{iL\sin(\pi n a/L)} \ .$$

Nel caso monodimensionale abbiamo, ad esempio

$$(p\psi)_n = \sum_{n'=-N}^{N} p(n-n')\psi_{n'}$$

e tutti i punti del reticolo concorrono alla formazione della nuova funzione d'onda $p\psi$.

L'ultimo passo che ci resta di fare è rimuovere il *cutoff* rimasto, quello infrarosso L del dominio cubico $(-L/2, L/2]^D \subset \mathbb{R}^D$, oppure quello ultravioletto a del reticolo infinito $\mathbb{Z}^D$. Con le regole sopracitate circa le proprietà di scala delle funzioni d'onda, dalle relazioni (7.64) e (7.63) oppure dalle (7.66) e (7.67) si ottengono allora le formule della trasformazione di Fourier per $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^D)$

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$$

$$\langle \mathbf{x}|\psi\rangle = \psi(\mathbf{x}) = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D}\,\langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle\,\langle \mathbf{k}|\psi\rangle = \int \frac{d^D k}{2\pi^D}\,\tilde{\psi}(\mathbf{k})\,e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$$

$$\langle \mathbf{k}|\psi\rangle = \tilde{\psi}(\mathbf{k}) = \int d^D x\,\langle \mathbf{k}|\mathbf{x}\rangle\,\langle \mathbf{x}|\psi\rangle = \int d^D x\,\psi(\mathbf{x})\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\,,$$

dove gli integrali s'intendono estesi a tutto $\mathbb{R}^D$. Lo stesso risultato si esprime formalmente attraverso le relazioni di ortogonalità e completezza delle basi generalizzate $\{|\mathbf{x}\rangle,\ \mathbf{x}\in\mathbb{R}^D\}$ e $\{|\mathbf{k}\rangle,\ \mathbf{k}\in\mathbb{R}^D\}$:

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = \delta^{(D)}(x-x')\,, \qquad \int d^D x\,|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}| = \mathbb{1}$$

$$\langle \mathbf{k}|\mathbf{k}'\rangle = (2\pi)^D\delta^{(D)}(x-x')\,, \qquad \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D}\,|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}| = \mathbb{1}\,.$$

La diversa normalizzazione per posizioni e momenti segue dalla scelta $\langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ al posto della più simmetrica $\langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle = (2\pi)^{-D/2}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$. Essa corrisponde a normalizzare ad una particella il **flusso** uniforme di particelle descritto da un'onda piana. Infatti la densità di probabilità ρ e la corrente di probabilità $\mathbf{j}$ (vedi §5.2.6) associate alla funzione d'onda $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle$ valgono esattamente

$$\rho(\mathbf{x}) = |\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})|^2 = 1\,, \quad \mathbf{j}(\mathbf{x}) = \frac{\hbar}{m}\,\mathfrak{Im}\left[\bar{\psi}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})\nabla\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})\right] = \boldsymbol{\nu}\,,$$

dove $\boldsymbol{\nu} = \mathbf{p}/m = \hbar\mathbf{k}/m$ è proprio la velocità della particella.

7.7. Evoluzione temporale

La nozione di trasformazione di simmetria gioca un ruolo fondamentale nel completamento dell'impianto formale della meccanica quantistica, laddove la descrizione "dinamica" del sistema fisico $\mathcal{S}$ si aggiunge a quella sostanzialmente "cinematica" o "statica" definita dai postulati I, II e III.

Si supponga di aver preparato $\mathcal{S}$ in un determinato stato ρ mediante gli opportuni esperimenti di prima specie. Prima di effettuare una ulteriore misurazione passa in generale un certo lasso di tempo, in cui il

sistema evolve indisturbato. Con questo si intende che $\mathcal{S}$ non interagisce con altri sistemi (nel qual caso parleremo di evoluzione libera) oppure subisce l'influenza di determinate forze esterne le cui sorgenti per ipotesi non reagiscono in modo osservabile all'interazione con $\mathcal{S}$. Si noti che, al contrario, una misurazione corrisponde per definizione al caso in cui tale reazione non può venir trascurata, in quanto definisce l'osservazione stessa. Sia dunque t_0 la coordinata temporale assegnata all'inizio della suddetta evoluzione indisturbata di $\mathcal{S}$ e $t > t_0$ quella che specifica il momento in cui una nuova osservazione viene effettuata. Ora, secondo la meccanica quantistica tutti i possibili stati puri sono rappresentati dai raggi di un unico spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, ricostruito a partire da osservazioni pregresse comunque terminate all'istante t_0. Quindi $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ è senz'altro stabile sotto l'evoluzione temporale successiva. Inoltre, nella stessa logica, anche le osservabili di $\mathcal{S}$, nel senso operativo del termine, sono determinate indipendentemente dall'evoluzione temporale del sistema: esse fanno riferimento a precisi arrangiamenti e procedure sperimentali che restano generalmente immutate tra un'osservazione e l'altra. Naturalmente è possibile introdurre una dipendenza temporale esplicita anche nelle osservabili, considerando arrangiamenti variabili nel tempo, ma comunque non connessi all'evoluzione temporale di $\mathcal{S}$.

Deve dunque essere possibile rappresentare l'evoluzione temporale indisturbata di $\mathcal{S}$ come un'applicazione di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ in se stesso, ovvero

$$|\psi\rangle \equiv |\psi(t_0)\rangle \longrightarrow |\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}_{\mathcal{S}} \,, \tag{7.74}$$

per ogni $|\psi\rangle$ di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. In particolare, per lo stato $\rho = \sum_j w_j \left|\psi_j\right\rangle\left\langle\psi_j\right|$ avremo

$$\rho \equiv \rho(t_0) \longrightarrow \rho(t) = \sum_j w_j \left|\psi_j(t)\right\rangle\left\langle\psi_j(t)\right| \,,$$

dove le probabilità w_j restano costanti nel tempo, dato che l'informazione raccolta sullo stato del sistema non cambia se il sistema evolve indisturbato. D'altro lato questa informazione si esprime concretamente attraverso la possibilità di formulare previsioni su future osservazioni secondo il postulato III, per cui la conservazione dell'informazione, una volta estesa anche agli stati puri, deve tradursi in una conservazione dei moduli quadri dei prodotti scalari. Queste considerazioni servono a giustificare il seguente fondamentale postulato IV, la cui validità risiede comunque nelle innumerevoli conseguenze sperimentalmente verificate:

Postulato IV

L'evoluzione temporale indisturbata del sistema fisico $\mathcal{S}$ dall'istante iniziale t_0 a quello finale t è realizzata

mediante una trasformazione di simmetria $T(t, t_0)$ su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$.

Dato che $T(t_0, t_0)$ coincide con la trasformazione identica, la naturale richiesta di continuità obbliga l'operatore $U(t, t_0)$, che secondo il teorema di Wigner rappresenta $T(t, t_0)$, ad essere unitario piuttosto che antiunitario. Dunque abbiamo

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)\,|\psi(t_0)\rangle \tag{7.75}$$

per i vettori di stato e

$$\rho(t) = U(t, t_0)\rho(t_0)U(t, t_0)^\dagger \tag{7.76}$$

per gli stati in generale, dove

$$U(t, t_0)U(t, t_0)^\dagger = U(t, t_0)^\dagger U(t, t_0) = \mathbb{1}$$

e $U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$.

Spezzando l'intervallo temporale (t_0, t) al tempo intermedio t_1 e ripetendo l'analisi per gli intervalli (t_0, t_i) e (t_1, t) si ottiene la **legge di composizione** degli operatori di evoluzione temporale

$$U(t, t_1)\,U(t_1, t_0) = e^{i\chi(t,t_1,t_0)}U(t, t_0)\ ,$$

dove a priori dobbiamo ammettere un fattore di fase dipendente da entrambi gli intervalli temporali. In altri termini, la famiglia $\{U(t, t_0)|t,\ t_0 \in \mathbb{R},\ t \geq t_0\}$ fornisce una rappresentazione proiettiva delle trasformazioni di simmetria $T(t, t_0)$. La naturale richiesta di associatività per la composizione di tre operatori di evoluzione comporta però che $\chi(t, t_1, t_0)$ deve avere la forma (l'esercizio è lasciato al lettore)

$$\chi(t, t_1, t_0) = \tilde{\chi}(t, t_1) + \tilde{\chi}(t_1, t_0) - \tilde{\chi}(t, t_0)\ .$$

Quindi, sfruttando il fatto che $T(t, t_0)$ determina $U(t, t_0)$ solo a meno di un fattore di fase, possiamo ridefinire $U(t, t_0)$

$$U(t, t_0) \longrightarrow e^{i\tilde{\chi}(t,t_0)}U(t, t_0)\ ,$$

per cui la legge di composizione diventa semplicemente

$$U(t, t_1)\,U(t_1, t_0) = U(t, t_0)\ . \tag{7.77}$$

Risulta ora naturale estendere questa relazione a $t < t_1$ ed in particolare ottenere, ponendo $t = t_0$

$$U(t_0, t) = U(t, t_0)^{-1} = U(t, t_0)^\dagger\ .$$

In moltissime situazioni concrete la dinamica cui $\mathcal{S}$ è soggetto risulta invariante per **traslazioni temporali** , nel senso che né le forze (interne

ed esterne) agenti su $\mathcal{S}$ né i parametri cinematici propri di $\mathcal{S}$ dipendono esplicitamente dal tempo. In tal caso deve valere

$$U(t, t_0) = U(t + \tau, t_0 + \tau)$$

per un arbitrario intervallo temporale τ, e quindi $U(t, t_0)$ deve dipendere solo dalla differenza $t - t_0$ dei suoi argomenti. Denotando allora l'operatore di evoluzione con $U(t - t_0)$, la legge di composizione si riscrive

$$U(t_1)U(t_2) = U(t_1 + t_2) \, .$$

Quest'ultima relazione, insieme alla ovvia $U(0) = \mathbb{1}$, definisce la famiglia $\{U(t),\ t \in \mathbb{R}\}$ come gruppo abeliano ad un parametro. Se questo gruppo è continuo in senso forte (vedi paragrafo precedente) il teorema di Stone afferma che

$$U(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)H/\hbar} \tag{7.78}$$

dove H è l'operatore autoaggiunto che genera $\{U(t),\ t \in \mathbb{R}\}$, ovvero l'operatore Hamiltoniano. Poiché H genera l'evoluzione temporale, il suo spettro viene identificato con lo spettro energetico del sistema $\mathcal{S}$: in altri temini, H è l'osservabile energia.

Differenziando rispetto a t la relazione $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)\,|\psi(t_0)\rangle$ si ottiene ora l'equazione di Schroedinger

$$i\hbar \frac{d}{dt}\,|\psi(t)\rangle = H\,|\psi(t)\rangle \ , \tag{7.79}$$

valida per tutti i vettori di stato che appartengono $\mathcal{D}(H)$, il dominio di definizione di H. Si noti che poiché H e $U(t)$ commutano, è sufficiente che $|\psi\rangle$ appartenga a $\mathcal{D}(H)$ ad un certo istante affinché vi appartenga per sempre. L'equazione di Schroedinger (7.79) è scritta in forma astratta, senza riferimento alcuno alla specifica rappresentazione di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. Per stabilire il contatto con l'equazione di Schroedinger introdotta e studiata nel precedente capitolo dedicato allo meccanica ondulatoria, è sufficiente considerare come sistema fisico $\mathcal{S}$ una singola particella e come rappresentazione quella della posizione. Proiettando quindi l'Eq. (7.79) sui vettori $|x\rangle$ degli stati perfettamente localizzati, si ottiene

$$\langle x|\, i\frac{d}{dt}\,|\psi(t)\rangle = i\frac{d}{dt}\,\langle x|\psi(t)\rangle = i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t)$$

da una parte e

$$\langle x|\, H\,|\psi(t)\rangle = (H\psi)(x, t) = \int dy\, \langle x|\, H\,|y\rangle\, \langle y|\psi(t)\rangle$$

dall'altra. Il problema sta ora nello stabilire la forma esplicita del *nucleo integrale* $\langle x|\, H\,|y\rangle$. Il **principio di corrispondenza** suggerisce che H abbia la stessa forma, come funzione delle osservabili canoniche (posizioni $\{q\}$ e momenti $\{p\}$), che possiede in meccanica classica la funzione

Hamiltoniana (che è la generatrice canonica delle traslazioni temporali). Poiché gli operatori q e p che rappresentano una data coppia canonica non commutano, vi sono in generale dei problemi di ordinamento (vedi al cap. 5 e all'App. B.8). Questi sono comunque assenti per Hamiltoniane della forma tipica $H = p^2/2 + V(q)$ (in opportune unità di misura). Ricordando che $\langle x|\, p\, |y\rangle = -i\hbar\delta'(x-y)$ si osserva che l'operatore Hamiltoniano diventa un operatore differenziale sulla funzione d'onda $\psi(x)$ e l'equazione di Schroedinger viene riprodotta nella sua forma originale.

L'operatore Hamiltoniano può essere introdotto anche quando l'evoluzione temporale non è invariante per traslazioni dell'origine dei tempi, cioè quando $U(t,t_0)$ non dipende solo dalla differenza $t-t_0$. Procedendo al livello formale, abbiamo identicamente

$$i\hbar\frac{d}{dt}U(t,t_0) = H(t)U(t,t_0)\ , \tag{7.80}$$

dove l'operatore Hamiltoniano $H(t)$ si scrive

$$H(t) = i\hbar\left[\frac{d}{dt}U(t,t_0)\right]U(t,t_0)^{-1}\ . \tag{7.81}$$

$H(t)$ è formalmente autoaggiunto grazie all'unitarietà di $U(t,t_0)$ ($UU^\dagger = \mathbb{1} \Rightarrow d/dt(UU^\dagger) = dU/dt\, U^\dagger + U^\dagger\, dU/dt = 0$) e non dipende da t_0 poiché $U(t,t_0') = U(t,t_0)U(t_0,t_0')$, con il secondo fattore t-indipendente e quindi destinato a cancellarsi nella (7.81).

Componendo le relazioni (7.80) e (7.75) si ottiene la forma più generale dell'equazione di Schroedinger

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H(t)\,|\psi(t)\rangle\ , \tag{7.82}$$

che comprende il caso di un Hamiltoniano dipendente dal tempo. Nel caso di stati non necessariamente puri, si ottiene invece, differenziando la relazione (7.76) ed usando ancora la (7.80)

$$i\hbar\frac{d}{dt}\rho(t) = [H(t)\,,\rho(t)]\ .$$

Infine l'equazione (7.80) e la condizione al contorno $U(t_0,t_0) = \mathbb{1}$ si riassumono nella forma integrale

$$U(t,t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, U(t',t_0)H(t')\ ,$$

la quale viene (sempre formalmente) risolta per iterazione

$$U(t,t_0) = \lim_{n\to\infty} U^{(n)}(t,t_0)$$

partendo da $U^{(0)}(t,t_0) = \mathbb{1}$ e ponendo. per $n \geq 1$,

$$U^{(n)}(t,t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, U^{(n-1)}(t',t_0)H(t')\,.$$

Si genera in tal modo la serie infinita

(7.83)

$$U(t,t_0) = \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, H(t_1)H(t_2)\ldots H(t_n)\,.$$

Si definisce il prodotto cronologicamente ordinato (o prodotto $\mathbb{T}$-ordinato) di operatori

$$\begin{aligned}&\mathbb{T}\, H(t_1)H(t_2)\ldots H(t_n)\\ &\quad = \sum_{P\in S_N} \theta(t_{P1},t_{P2},\ldots,t_{Pn})H(t_{P1})H(t_{P2})\ldots H(t_{Pn})\,,\end{aligned}$$

dove $\theta(t_1,t_2,\ldots,t_n)$ denota la generalizzazione a molteplici argomenti della funzione a gradino $\theta(t) = \frac{1}{2}(1 + t/|t|)$, cioè

$$\theta(t_1,t_2,\ldots,t_n) = \begin{cases} 1 & \text{se } t_1 > t_2 > \ldots > t_n \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}\,.$$

Il termine n-esimo della serie (7.83) si scrive

$$\begin{aligned}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t} dt_n\, \mathbb{T}\, H(t_1)H(t_2)\ldots H(t_n)\\ = \frac{1}{n!}\,\mathbb{T}\left[\frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' H(t')\right]^n\,.\end{aligned}$$

Otteniamo così per $t \geq t_0$, la forma compatta del cosiddetto **esponenziale $\mathbb{T}$-ordinato**

$$U(t,t_0) = \mathbb{T}\exp\left[\frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')\right]\,. \tag{7.84}$$

Qualora $H(t)$ commuti con $H(t')$, per ogni scelta di t e t' nell'intervallo $[t_0,t]$, l'ordinamento temporale è irrilevante ed il simbolo $\mathbb{T}$ può essere omesso. In particolare, se l'operatore Hamiltoniano non dipende dal tempo, $dH(t)/dt = 0$, l'espressione (7.84) si riduce immediatamente alla (7.78).

Abbiamo dunque visto come l'evoluzione temporale nello spazio di Hilbert dei vettori di stato sia governata dall'equazione di Schroedinger (7.79) o (7.82). All'atto pratico $\mathcal{H}_S$ è inizialmente ricostruito in una specifica rappresentazione, cioè a partire dallo spettro congiunto di un insieme completo di osservabili compatibili $\{A\} = A_1, A_2, \ldots, A_n$. I corrispondenti autovettori $\{|\alpha\rangle\}$ forniscono un sistema di riferimento ortogonale in $\mathcal{H}_S$, rispetto al quale il generico vettore di stato $|\psi(t)\rangle$ risulta istante

per istante individuato dalla funzione d'onda $\psi(\alpha, t) = \langle\alpha|\psi(t)\rangle$. Il sistema di riferimento resta costante nel tempo, ovvero resta fissato una volta per tutte l'insieme $\{A\}$ utilizzato per ricostruire $H_{\mathcal{S}}$. Da questo punto di vista, essendo di fatto $\{A\}$ arbitrario, possiamo considerare tutte le osservabili di $\mathcal{S}$ fissate. Le osservabili vanno qui intese in senso operativo, come ben definite procedure sperimentali che, in quanto tali, sono naturalmente definite a priori. Quindi il "moto" di $|\psi(t)\rangle$ avviene *relativamente* alle osservabili. Questa visione dell'evoluzione temporale prende il nome di rappresentazione di Schroedinger.

È possibile interpretare l'evoluzione temporale nel modo opposto, vale a dire mantenendo fissi i vettori di stato e facendo "muovere" le osservabili. Dal punto di vista concettuale, questo significa spostare sugli stati la valenza operativa, per cui gli stati sono puramente "stati sperimentali", ovvero fissate collezioni di distribuzioni di probabilità sui risultati degli esperimenti, mentre le osservabili riacquistano un ruolo di variabili dinamiche analogo a quello proprio della meccanica classica. Dal punto di vista del formalismo della meccanica quantistica, questo passaggio è davvero elementare: all'istante t_0, tutte le informazioni sullo stato $\rho(t_0) = \rho$ del sistema $\mathcal{S}$ sono contenute nell'insieme dei valori medi $\langle A\rangle_\rho = \mathrm{Tr}\,\rho(t_0)A$ al variare dell'osservabile A. Ad esempio, considerando come A la famiglia spettrale $E_B(\mathfrak{b})$ di un'altra osservabile, il valor medio $\langle E_B(\mathfrak{b})\rangle$ diventa la distribuzione di probabilità per B. Queste informazioni cambiano nel tempo, durante l'evoluzione indisturbata di $\mathcal{S}$, secondo l'equazione (7.76)

$$\langle A\rangle_\rho \longrightarrow \langle A\rangle_{\rho(t)} = \mathrm{Tr}\,\rho(t)A = \mathrm{Tr}\,U(t,t_0)\rho(t_0)U(t,t_0)^\dagger A$$

Ma sfruttando l'invarianza ciclica delle traccia, si ottiene

$$\langle A\rangle_{\rho(t)} = \mathrm{Tr}\,\rho(t_0)U(t,t_0)^\dagger A\,U(t,t_0) = \mathrm{Tr}\,\rho(t_0)A(t)_H = \langle A(t)_H\rangle_\rho$$

dove $A(t)_H$ rappresenta l'evoluta temporale di $A \equiv A(t_0)_H$

$$A(t)_H = U(t,t_0)^\dagger A\,U(t,t_0) \tag{7.85}$$

Lo stesso risultato si ottiene nel caso di uno stato puro descritto dal vettore normalizzato $|\psi\rangle$

$$\begin{aligned}\langle\psi(t)|\,A\,|\psi(t)\rangle &= \langle\psi(t_0)|\,U(t,t_0)^\dagger A\,U(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle\\ &= \langle\psi(t_0)|\,A(t)_H\,|\psi(t_0)\rangle\end{aligned}$$

Questa descrizione dell'evoluzione temporale, caratterizzata da traiettorie del moto per le osservabili sullo sfondo di stati che restano fissi, prende il nome di rappresentazione di Heisenberg. La versione differenziale della relazione (7.85) si scrive

$$i\hbar\frac{d}{dt}A(t)_H = [A(t)_H, H(t)_H]\,,$$

dove $H(t)_H = U(t,t_0)^\dagger H(t) U(t,t_0) = iU(t,t_0)^\dagger dU(t,t_0)/dt$. Ovviamente $H(t) = H(t)_H = H$ nel caso di invarianza per traslazioni temporali. Possiamo generalizzare questa equazione del moto includendo il caso in cui $A = A(t)$ abbia una dipendenza esplicita dal tempo (cioè indipendente dalla dinamica di $\mathcal{S}$ e dovuta ad una definizione operativa di A effettivamente variabile nel tempo). In tal caso

$$A(t)_H = U(t,t_0)^\dagger A(t) U(t,t_0) \,, \tag{7.86}$$

con la versione differenziale

$$i\hbar \frac{d}{dt} A(t)_H = [A(t)_H, H(t)_H] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A(t)_H \,,$$

in cui

$$\frac{\partial}{\partial t} A(t)_H \equiv U(t,t_0)^\dagger \frac{\partial A(t)}{\partial t} U(t,t_0) \,. \tag{7.87}$$

Nel caso di osservabili senza alcuna dipendenza esplicita dal tempo si tende comunemente a tralasciare il suffisso $_H$ in $A(t)_H$.

7.7.1. Stati stazionari e costanti del moto. In meccanica classica un sistema $\mathcal{S}$ si dice **conservativo** qualora la funzione Hamiltoniana non dipenda esplicitamente dal tempo. In tal caso l'energia di $\mathcal{S}$ è costante nel tempo e coincide con il valore assunto dall'Hamiltoniana in un qualunque punto della traiettoria del moto. L'analoga situazione in meccanica quantistica si ottiene quando l'operatore Hamiltoniano H non dipende dal tempo, per cui $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$. Allora la distribuzione di probabilità dell'energia risulta costante in un generico stato ρ, dato che $[E_H(b), U(t)] = 0$. In particolare, se l'energia era esattamente nota ad un certo istante, cioè $\Delta H = 0$, il suo valore resta esattamente noto e costante per tutto il tempo successivo. Come sappiamo, nel caso di stati puri $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, la condizione $\Delta H = 0$ equivale alla richiesta che $|\psi\rangle$ sia un autovettore di H

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \,.$$

Evidentemente allora

$$U(t)|\psi\rangle = e^{-iEt/\hbar}|\psi\rangle$$

e lo stato ρ è stazionario: $d\rho/dt = 0$. Lo stesso risultato si ottiene evidentemente nel caso di miscele statistiche di autostati dell'energia, ovvero quando $[H, \rho] = 0$, in accordo con l'equazione del moto (7.82). Si noti che in un sistema conservativo la distribuzione di probabilità dell'energia è costante indipendentemente dal fatto che lo stato ρ sia stazionario o meno. Ciò che caratterizza gli stati stazionari è che la distribuzione di probabilità di *qualunque* osservabile (che non dipende esplicitamente dal tempo) è pure costante, dato che $\rho(t) = \rho(t_0)$ implica subito che $\langle A(t)\rangle = \langle A(t_0)\rangle$.

Viceversa, possiamo chiederci quando una determinata osservabile A possiede una distribuzione di probabilità costante nel tempo indipendentemente dallo stato del sistema. Assumendo che A non dipenda esplicitamente da t e che il sistema sia conservativo, dall'equazione di Heisenberg (7.85) otteniamo subito la condizione

$$\boxed{[H, A] = 0}$$

In tal caso A si dice essere una *costante del moto*. Si noti che costanti del moto possono esistere in linea di principio anche per sistemi non-conservativi: è necessario e sufficiente che A commuti con $H(t)$ per ogni valore di t. Restando nell'ambito dei sistemi conservativi, osserviamo che l'insieme di tutte le osservabili che sono costanti del moto formano un'algebra di Lie reale: se A e B commutano con H allora anche $\alpha A+\beta B$ (α e β reali) è un'osservabile e commuta con H e così pure per $i[A, B]$, grazie all'identità di Jacobi $[A, [B, H]] + [B, [H, A]] + [H, [A, B]] = 0$.

7.7.2. Relazione di indeterminazione tra tempo ed energia. Consideriamo ora un sistema $\mathcal{S}$ conservativo, un'osservabile A che non dipende esplicitamente dal tempo ed uno stato puro descritto dal vettore normalizzato $|\psi\rangle$. La relazione di indeterminazione tra le deviazioni standard di $A(t) = e^{iHt/\hbar} A\, e^{-iHt/\hbar}$ e dell'energia E (ovvero dell'Hamiltoniana H) si scrive (vedi §7.3.3)

$$\Delta A(t)\, \Delta E \geq \tfrac{1}{2} |\langle\psi| [A(t), H(t)] |\psi\rangle| \,.$$

Facendo uso dell'equazione di Heisenberg questo diventa

$$\Delta A(t)\, \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d}{dt} \langle A(t)\rangle \right| , \tag{7.88}$$

dove $\langle A(t)\rangle \equiv \langle\psi| A(t) |\psi\rangle$. Come sappiamo, $\Delta A(t)$ è l'indeterminazione della misura di $A(t)$ nello stato $|\psi\rangle$, ovvero di A nello stato $|\psi(t)\rangle$. D'altro lato $d\langle A(t)\rangle/dt$ è la velocità con cui si sposta il valore medio di $A(t)$, per cui la quantità

$$\tau(A(t)) = \frac{\Delta A(t)}{\left|\frac{d}{dt} \langle A(t)\rangle\right|} \tag{7.89}$$

è un tempo caratteristico dell'evoluzione dell'osservabile A, che fornisce una stima dell'intervallo di tempo necessario affinché il valore medio di $A(t)$ si sposti della quantità $\Delta A(t)$. Più grande è $\tau(A(t))$, più lenta è l'evoluzione della distribuzione di probabilità di $A(t)$ definita dallo stato $|\psi\rangle\langle\psi|$. In particolare, se A è una costante del moto, qualunque sia $|\psi\rangle$ il denominatore in (7.89) si annulla e $\tau(A(t)) = \infty$. Lo stesso vale se A è generica ma $|\psi\rangle$ è un vettore di stato stazionario. Infine se $|\psi\rangle$ è un autovettore di A, sia il numeratore che il denominatore in

(7.89) si annullano, ma l'interpretazione di $\tau(A(t))$ impone ancora che $\tau(A(t)) = \infty$.

Dal punto di vista sperimentale, l'evoluzione temporale indisturbata di un sistema fisico $\mathcal{S}$, inizialmente preparato in uno stato puro $|\psi\rangle\langle\psi|$, sarà tanto più finemente risolubile mediante la misurazione dell'osservabile A quanto più piccolo è $\tau(A(t))$. Supponendo di aver preparato tante copie di $\mathcal{S}$ nel medesimo stato iniziale e di misurare A su un certo numero di copie all'istante t e su un altro numero di copie all'istante $t' > t$, verranno osservate differenze significative nelle due distribuzioni di probabilità (nel senso sperimentale di frequenze relative dei differenti risultati) solo se $t' - t$ è più grande di $\tau(A(t))$. Quindi i due istanti temporali t' e t possono essere tanto meglio risolti quanto più piccolo è $\tau(A(t))$ (naturalmente la misurazione di un'osservabile non è un'operazione istantanea, per cui un limite inferiore alla risolubilità temporale è comunque dato dalla effettiva durata dell'interazione tra il sistema $\mathcal{S}$ e l'apparato di misura). Se indichiamo con Δt il limite inferiore di $\tau(A(t))$ al variare di A tra tutte le osservabili di $\mathcal{S}$ che non dipendono esplicitamente dal tempo, vale a dire

$$\Delta t = \min_A \tau(A(t))$$

(si ricordi che Δt dipende ancora dallo stato $|\psi\rangle\langle\psi|$ e dal tempo t), dalla relazione (7.88) otteniamo

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \tag{7.90}$$

che costituisce la relazione di indeterminazione tra tempo ed energia. È opportuno sottolineare che questa relazione, sebbene formalmente identica a quella esistente tra posizione e momento (dovuta alle regole di commutazione canoniche), non è ad essa assimilabile: il tempo non è un'osservabile del sistema fisico $\mathcal{S}$ in considerazione, né esiste in generale un operatore autoaggiunto canonicamente coniugato con l'operatore Hamiltoniano il cui spettro sia interpretabile come la collezione di tutti gli istanti temporali. Tuttavia, specialmente per via della simmetria relativistica tra spazio e tempo da una parte, e momento lineare ed energia dall'altra (per una singola particella, $\mathbf{q}$ e t da una parte, e $\mathbf{p}$ ed E dall'altra formano dei quadrivettori di Lorentz), la relazione (7.90) viene spesso considerata sullo stesso piano di quella tra posizione e momento.

7.7.3. Processi stazionari. La relazione di indeterminazione tra tempo ed energia serve a caratterizzare più precisamente i *processi stazionari*, nei quali energia e/o materia vengono trasportate su distanze macroscopiche ad un ritmo costante nel tempo. Un esempio concreto di tale processo è costituito dalla produzione e diffusione, o **scattering**, di un

fascio di particelle e dalla successiva rivelazione delle stesse. Lontano dalla fase di accensione e spegnimento, le particelle sono emesse dalla sorgente, diffuse da bersagli o altre apparecchiature ed infine rivelate da appositi strumenti con un flusso costante nel tempo. La durata complessiva T di questa fase stabile è molto più grande dei tempi caratteristici di emissione, di volo e di assorbimento di una singola particella, ed è comunque indipendente dagli stessi. Per fasci di particelle massive o per radiazione elettromagnetica incoerente e/o di debole intensità, possiamo considerare il processo come la ripetizione di un gran numero di volte dello stesso esperimento su una singola particella. Risulta quindi naturale descrivere lo stato di una singola particella mediante autovettori $|E\rangle$ della Hamiltoniana corrispondenti allo spettro continuo. La relazione (7.90) afferma allora che l'indeterminazione ΔE dell'autovalore E è comunque dell'ordine di $\hbar/T$, dato che l'intero intervallo T rappresenta l'indeterminazione temporale sull'evento microscopico iniziale, quello di emissione.

Per un generico processo conviene porre $E = \hbar\omega$, assumendo $\omega > 0$, e denotare con $|\omega, \tau\rangle$ gli autovettori dell'energia, dove τ rappresenta tutti gli altri numeri quantici conservati (che possiamo assumere discreti; come esempio si veda lo sviluppo in onde parziali dei processi di diffusione al §12.2). La presenza di un tempo di durata T, grande ma finito, fa sì che la grandezza $2\pi/T$ giochi il ruolo di limite inferiore sulla risoluzione delle frequenze ω, come evidenziato dalla relazione di ortogonalità dello spettro continuo

$$\langle \omega, \tau | \omega', \tau' \rangle = \delta_{\tau\tau'} \delta(\omega - \omega') = \delta_{\tau\tau'} \lim_{T\to\infty} \int_{-T/2}^{T/2} \frac{dt}{2\pi} e^{i(\omega-\omega')t} .$$

Dunque per T finito gli autostati dell'energia, intesi nel senso operativo del termine, hanno norma finita

$$\langle \omega, \tau | \omega, \tau \rangle \simeq \frac{T}{2\pi} . \tag{7.91}$$

Ora, dovendo rappresentare un processo stazionario, la matrice di densità ρ deve commutare con la Hamiltoniana H ed essere quindi diagonale sui vettori $|\omega, \tau\rangle$, ovvero

$$\rho = \sum_{\tau\tau'} \int d\omega \, |\omega, \tau\rangle \, w_{\tau\tau'}(\omega) \, \langle \omega, \tau' | . \tag{7.92}$$

La funzione nonnegativa $w_{\tau\tau}(\omega)$ rappresenta la dispersione in energia del processo nel *canale* τ, e possiede l'interpretazione classica di probabilità che il sistema fisico $\mathcal{S}$ in esame (una particella del fascio, ad esempio) si trovi nello stato puro $|\omega, \tau\rangle\langle\omega, \tau|$. I termini fuori diagonale $w_{\tau\tau'}(\omega)$, $\tau \neq \tau'$, non hanno un'interpretazione così diretta: essi costituiscono, come vedremo, un esempio di **coerenze residue** (vedi §7.4). Si noti che ρ non

è propriamente normalizzata, dato che la sua traccia vale (vedi Eq. (7.91))

$$\mathrm{Tr}\,\rho = \frac{T}{2\pi}\sum_{\tau}\int d\omega\, w_{\tau\tau}(\omega) = \frac{T}{2\pi}$$

e diverge nel limite $T \to \infty$. Va inoltre ricordato che gli autostati dell'energia sono tipicamente del tutto delocalizzati nello spazio (si pensi ad una particella libera descritta da un'onda piana).

È importante sottolineare che, a parte le eventuali coerenze residue relative agli altri numeri quantici, ρ descrive il processo in termini di una somma *incoerente* di autostati dell'energia, spazialmente delocalizzati e popolati con probabilità $w_{\tau\tau}(\omega)$. A prima vista questa descrizione sembra in contrasto con l'idea stessa di $\mathcal{S}$ come sistema fisico a sé stante: se $\mathcal{S}$ è una delle particelle di un fascio la descrizione più naturale sembrerebbe dover fare uso di un pacchetto d'onda $|\psi\rangle$ ben localizzato, caratteristico della sorgente in questione, con la dispersione della frequenza nel canale τ data dalla probabilità quantomeccanica $|\langle\omega,\tau|\psi\rangle|^2$.

In realtà le due descrizioni sono di fatto equivalenti, proprio a causa della relazione di indeterminazione tra tempo ed energia. Usando sempre il fascio di particelle come esempio, nella descrizione in termini di pacchetti d'onda le particelle sono emesse dalla sorgente tutte nello stesso stato puro $|\psi\rangle\langle\psi|$, ciascuna in un arbitrario istante t_0 dell'intervallo T. Si tratta di uno stato temporalmente delocalizzato. Da un punto di vista formale, al tempo $t > t_0$ avremmo ancora lo stato puro $U(t-t_0)\,|\psi\rangle\langle\psi|\,U(t-t_0)^\dagger$, ma il vero stato ρ' del sistema, quello che raccoglie l'informazione realmente accessibile, si ottiene mediando sull'istante di emissione t_0:

$$\rho' = \frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2} dt_0\, U(t-t_0)\,|\psi\rangle\langle\psi|\,U(t-t_0)^\dagger = \sum_{\tau}\int d\omega\, |\omega,\tau\rangle\,\langle\omega,\tau|\psi\rangle \times$$
$$\sum_{\tau'}\int d\omega'\, \langle\psi|\,\omega',\tau'\rangle\,\langle\omega',\tau'|\,e^{-i(\omega-\omega')t}\,\frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2} dt_0\, e^{i(\omega-\omega')t_0}\ .$$

Nel limite $T \to \infty$ l'integrazione su t_0 produce $2\pi\delta(\omega-\omega')$, per cui si verifica che

$$\rho \simeq \frac{T}{2\pi}\rho'\ ,$$

con l'identificazione

$$w_{\tau\tau'}(\omega) = \langle\omega,\tau|\psi\rangle\,\langle\psi|\,\omega,\tau'\rangle\ .$$

In particolare la probabilità classica $w_{\tau\tau}(\omega)$ che una data particella del fascio abbia l'energia $\hbar\omega$ nel canale τ coincide con l'espressione quantomeccanica e sono assenti i termini misti con $\omega \neq \omega'$, che sono propri

della coerenza quantomeccanica. Le uniche eventuali coerenze residue riguardano gli altri numeri quantici, non più l'energia[9].

Nel caso di punti materiali liberi di muoversi in una sola dimensione, il risultato appena ottenuto pone le basi per l'interpretazione operativa delle soluzioni stazionarie e delocalizzate dell'equazione di Schroedinger in presenza di barriere di potenziale, già studiate al §6.3: esse effettivamente descrivono la frazione di particelle trasmesse e riflesse in un fascio stazionario. Le stesse considerazioni valgono per gli esperimenti di diffusione in tre dimensioni che saranno trattati al cap.12.

7.8. Quantizzazione canonica

Il postulato II afferma che ogni osservabile A del sistema fisico $\mathcal{S}$ è rappresentata da un operatore autoaggiunto su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, ma non dice nulla su come identificare tale operatore *a priori*, in una data rappresentazione di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, senza dover passare attraverso la ricostruzione operativa esplicita ottenuta misurando opportune probabilità di transizione. Anche se in linea di principio la ricostruzione operativa è sufficiente ai fini delle predizioni su successivi esperimenti che coinvolgano l'osservabile A (questa osservazione riassume l'idea originale di Heisenberg della cosiddetta "meccanica delle matrici" [**Hei63**]), dal punto di vista sia pratico che concettuale è molto importante poter disporre di *regole* per calcolare la forma operatoriale esplicita delle osservabili più rilevanti. Nel caso di osservabili dotate di analogo classico, tali regole sono riassunte nella cosiddetta **quantizzazione canonica**. *Le osservabili costituite dalle coordinate cartesiane* $q_1, q_2, \ldots, q_n$ *e dai relativi momenti coniugati* $p_1, p_2, \ldots, p_n$ *di un sistema fisico* $\mathcal{S}$ *sono rappresentate in meccanica quantistica da operatori autoaggiunti* $q_1, q_2, \ldots, q_n$ *e* $p_1, p_2, \ldots, p_n$ *che soddisfano alle* **regole di commutazione canoniche**

$$\boxed{[q_j, q_k] = 0\,, \quad [p_j, p_k] = 0\,, \quad [q_j, p_k] = i\hbar\delta_{jk}\,.} \tag{7.93}$$

Ad ogni osservabile classica $A(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n)$ *corrispondono tutti gli operatori autoaggiunti* $\hat{A}(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n)$ *tali che* $\hat{A} = A$ *nel limite formale* $\hbar \to 0$ *in cui tutte le variabili canoniche commutano.*

Varie osservazioni sono necessarie. Innanzitutto, ricordiamo che le **parentesi di Poisson** proprie delle q_j e p_j si scrivono

$$\{q_j, q_k\} = 0\,, \quad \{p_j, p_k\} = 0\,, \quad \{q_j, p_k\} = \delta_{jk}\,, \tag{7.94}$$

e per definizione fissano le p.d.P. di tutte le osservabili classiche. Analogamente, almeno al livello formale, le regole di commutazione canoniche

[9] Queste coerenze residue sono importanti, ad esempio, per la descrizione dello scattering di fasci polarizzati.

(7.93) determinano le parentesi di commutazione di ogni coppia di operatori A e B che siano funzioni analitiche simultaneamente di tutte le q_j e p_j (con ordinamento fissato!). Ci basta infatti verificare come il commutatore possieda le stesse proprietà algebriche delle p.d.P., vale a dire

$$\begin{gathered}[A\,,B] = -[B\,,A] \\ [\alpha A + \beta B\,,C] = \alpha[A\,,C] + \beta[B\,,C] \\ [AB\,,C] = A[B\,,C] + [A\,,C]B \\ [A\,,[B\,,C]] + [B\,,[C\,,A]] + [C\,,[A\,,B]] = 0\,.\end{gathered}$$

Abbiamo quindi la corrispondenza formale tra meccanica classica e meccanica quantistica

$$\{A, B\} \longrightarrow (i\hbar)^{-1}[A\,,B] \tag{7.95}$$

Per quanto riguarda il significato preciso della relazione di commutatore tra posizioni e momenti, è opportuno richiamare il **teorema di Wintner** già enunciato nel §5.2.3, il quale afferma che gli operatori canonici q, p non possono essere entrambi limitati. (Il fatto che essi non possano essere entrambi rappresentabili da matrici finite $r \times r$ è ovvio, in quanto si avrebbe subito la contraddizione $0 = \mathrm{Tr}\,[q\,,p] = i\hbar \mathrm{Tr}\,\mathbb{1} = i\hbar r$). Quindi la relazione $[q,\ ,p] = i\hbar\mathbb{1}$ va propriamente intesa come valida solo in un sottoinsieme denso di uno spazio di Hilbert infinito-dimensionale. In tal caso esistono molteplici realizzazioni di coppie canoniche che non sono semplici riscalamenti $q \to \lambda q$, $p \to p/\lambda$ le une delle altre (si veda l'esempio discusso in §7.6.3). Il teorema di Von Neumann (vedi ancora al §5.2.3) ci assicura che se lo spazio delle configurazioni, vale a dire lo spettro delle osservabili di posizione $q,$, coincide con $\mathbb{R}^n$, allora ogni rappresentazione irriducibile delle regole di commutazione canoniche è equivalente a quella cosiddetta di Schroedinger, vale a dire

$$\begin{aligned} q_j &= \text{moltiplicazione per } q_j \\ p_j &= -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial q_j}\,, \end{aligned}$$

definita sulle funzioni d'onda $\psi(q_1, \ldots, q_n)$.

Una formulazione più precisa di questo risultato, nella quale si evitano le sottigliezze legate alla natura illimitata di q e p, è quella proposta da Weyl. Possiamo limitarci al caso di una sola coppia q, p e sostituire $[q\,,p] = i\hbar\mathbb{1}$ con le regole di commutazione canoniche alla Weyl:

$$\begin{gathered} T(a)\,T(a') = T(a')\,T(a)\,, \quad V(b)\,V(b') = V(b')\,V(b) \\ T(a)\,V(b) = e^{-iab/\hbar}\,V(b)\,T(a)\,. \end{gathered} \tag{7.96}$$

Per ipotesi $T(a)$ e $V(b)$ sono operatori unitari per ogni $a, b \in \mathbb{R}$ e le regole (7.96) valgono su tutto lo spazio di Hilbert. Si dimostra allora che tutte le rappresentazioni irriducibili delle (7.96) sono equivalenti a quella in cui lo spazio di Hilbert è $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^n)$ e

$$(T(a)\psi)(x) = \psi(x-a)\,, \quad (V(b)\psi)(x) = e^{-ibx/\hbar}\psi(x)\,.$$

Gli operatori q e p sono quindi recuperati come **generatori** (vedi §7.6.3 e soprattutto §9.1.3) di $V(b)$ e $T(a)$, rispettivamente. q risulta ben definito su tutti i vettori $|\psi\rangle$ tali che il limite

$$\lim_{b\to 0} \frac{i\hbar}{b}\,[V(b) - \mathbb{1}]\,|\psi\rangle := q\,|\psi\rangle \tag{7.97}$$

esiste in senso forte. Analogamente il dominio di p è costituito dai vettori $|\phi\rangle$ tali che esiste in senso forte il limite

$$\lim_{a\to 0} \frac{i\hbar}{a}\,[T(a) - \mathbb{1}]\,|\psi\rangle := q\,|\psi\rangle\ . \tag{7.98}$$

Com'è noto, questo ci permette di identificare $T(a)$ e $V(b)$ con gli esponenziali $e^{-iap/\hbar}$ e $e^{-iaq/\hbar}$, rispettivamente. Le regole di commutazione canoniche per q e p seguono dalle (7.96) nel limite di a e b infinitesimi.

Dobbiamo infine osservare che la portata effettiva delle regole della quantizzazione canonica sulla costruzione dell'operatore che rappresenta una generica osservabile classica è in realtà molto limitata. La meccanica quantistica è una generalizzazione della meccanica classica, per cui possono esistere molteplici osservabili quantomeccaniche che si riducono alla stessa osservabile classica nel limite formale $\hbar \to 0$. La quantizzazione canonica è non ambigua solo per quanto riguarda le ossevabili di base, cioè le coordinate cartesiane ed i momenti ad esse coniugati. Già per quanto riguarda la "quantizzazione" di un sistema classico in coordinate lagrangiane generiche non vi sono regole a priori generalmente valide. Lo stesso dicasi per una generica osservabile classica $A(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n)$: vi sono svariate procedure, tutte a priori egualmente valide, per risolvere il **problema dell'ordinamento** dovuto al fatto che le q_j non commutano più con le p_j, introducendo un'ambiguità di base su termini di ordine $\hbar$. Nell'App. B.8 sono illustrate alcune di queste *regole di corrispondenza*. La lezione finale è che non esiste *in generale* un'unica legge di quantizzazione per tutte le osservabili. Per certe osservabili di fondamentale importanza però, come l'energia ed il momento angolare, vi sono argomentazioni basate su principi di simmetria che risultano molto stringenti (vedi al cap. 9). Dato che questi principi sopravvivono indenni il passaggio dalla meccanica classica alla meccanica quantistica, essi forniscono un punto di riferimento determinante per la quantizzazione.

Osservazione *[]Grazie al teorema di Von Neumann possiamo a buon diritto lasciar definitivamente cadere la notazione* $\mathfrak{q}_j$ *e* $\mathfrak{p}_j$ *specifica della meccanica quantistica: d'ora in poi indicheremo con* q_j *e* p_j *indistintamente le variabili classiche e gli operatori quantomeccanici. In particolare, questo si applica anche ai vettori posizione* $\mathbf{x}_j$ *ed ai vettori momento* $\mathbf{p}_j$ *di una collezione di* N *particelle.*

7.8.1. Equazioni di Heisenberg-Hamilton. Facendo riferimento alle equazioni di Heisenberg (7.85) ed alla corrisponenza formale (7.95), si ottengono le seguenti equazioni del moto di Heisenberg-Hamilton per un sistema con coordinate canoniche (q_j, p_j) ed Hamiltoniana $H = H(q, p)$,

$$\dot{q}_j = (i\hbar)^{-1}[q_j, H] = \frac{\partial H}{\partial p_j}\,, \quad \dot{p}_j = (i\hbar)^{-1}[p_j, H] = -\frac{\partial H}{\partial q_j}\,. \tag{7.99}$$

Non bisogna tuttavia dimenticare che si tratta di equazioni operatoriali, di fatto equivalenti all'equazione di Schroedinger, e che riassumono perciò tutte le caratteristiche della meccanica quantistica.

In certi casi particolari è possibile approssimare le (7.99) con equazioni ordinarie per i valori medi delle variabili canoniche. Ad esempio, per una particella con Hamiltoniana tipica $H = p^2/2m + V(\mathbf{x})$, dalle (7.99) otteniamo subito il cosiddetto **Teorema di Ehrenfest**

$$\langle \dot{\mathbf{x}} \rangle = \frac{1}{m}\,\langle \mathbf{p} \rangle\,, \quad \langle \dot{\mathbf{p}} \rangle = \langle \mathbf{F}(\mathbf{x}) \rangle\,.$$

dove $\mathbf{F} = -\nabla V$ è la forza che agisce sulla particella e $\langle \cdot \rangle$ rappresenta il valor medio in un certo stato $|\psi\rangle$. Queste equazioni non ci permettono ancora di affermare che i valori medi del momento e della posizioni ubbidiscano alle leggi classiche del moto, in quanto, in generale $\langle \mathbf{F}(\mathbf{x}) \rangle \neq \mathbf{F}(\langle \mathbf{x} \rangle)$. Si noti che la particella libera, la particella in un campo costante e l'oscillatore armonico sono gli unici esempi dove vale invece l'equaglianza per ogni $|\psi\rangle$. Negli altri casi, l'approssimazione

$$\dot{\mathbf{p}} \simeq \mathbf{F}(\langle \mathbf{x} \rangle)$$

sarà tanto migliore quanto più le anarmonicità del potenziale sono piccole nella regione di spazio in cui la funzione d'onda $\langle \mathbf{x}|\psi\rangle$ è non trascurabile.

7.9. Preparazioni e misure

I postulati I, II, III e IV definiscono la struttura *minimale* della meccanica quantistica, nella quale il problema della descrizione e degli effetti del procedimento di misurazione è volutamente ignorato. In effetti, nella versione minimale della meccanica quantistica sono contemplate due categorie ben distinte di oggetti: i sistemi fisici su cui si effettuano gli esperimenti, che abbiamo indicato sin qui con il generico simbolo $\mathcal{S}$, e gli *apparati sperimentali* con cui si effettuano le osservazioni, che indicheremo qui col

generico simbolo $\mathcal{A}$. I primi sono descritti dalla meccanica quantistica minimale, in accordo con i suddetti postulati. I secondi sono oggetti per definizione classici, le cui transizioni tra stati macroscopici distinti e ben definiti costituiscono il risultato degli esperimenti. A questi stati macroscopici non vengono applicate le regole della meccanica quantistica: l'ago di un indicatore si trova per ipotesi in uno stato con posizione e momento ben definiti, i "click" di un contatore Geiger o si sentono o non si sentono, in una camera a bolle si osservano tracce ben precise, non macchie casuali.

In modo del tutto generale, dal punto di vista della funzione logica di $\mathcal{A}$, possiamo descrivere lo stato di un apparato $\mathcal{A}$ in termini dell'occupazione o meno delle celle di memoria di un computer, usato per memorizzare ed analizzare i risultati di un esperimento: gli stati di questa memoria non sono linearmente sovrapponibili, al contrario di quelli del sistema fisico, le cui misurazioni hanno tuttavia dato origine a particolari transizioni nella memoria del computer. Dato che l'apparato $\mathcal{A}$ è comunque esso stesso un sistema fisico, così come la combinazione $\mathcal{S} \cup \mathcal{A}$ rilevante per descrivere il processo di misura, è chiaro che la versione minimale della meccanica quantistica non offre una rappresentazione del tutto soddisfacente del mondo fisico. La stessa distinzione tra $\mathcal{S}$ ed $\mathcal{A}$, in un determinato esperimento, non è generalmente univoca e cambia radicalmente da un esperimento all'altro. Si tratta di una distinzione logica, ancor più che operativa, che resta inevitabilmente al di fuori della meccanica quantistica minimale. D'altronde è la stesso postulato III, così come sopra formulato, che presuppone l'esistenza di apparati di misura come oggetti classici, con stati sempre ben definiti ed oggettivamente riconoscibili.

Da questo punto di vista la meccanica quantistica minimale è anche epistemologicamente incompleta: essa ha bisogno della meccanica classica per la sua stessa definizione. Inoltre, al contrario della meccanica classica, la meccanica quantistica fa uso di oggetti matematici, come i vettori di stato, che non rappresentano quantità direttamente osservabili. Per questa ragione, ogni tentativo di completare la meccanica quantistica, e/o di formularla su basi indipendenti, deve innanzitutto dare una interpretazione di questa parte non direttamente osservabile; si tratta della vecchia e tormentata questione: "che cos'è, dal punto vista fisico oggettivo, la funzione d'onda?". Si noti che tale questione è del tutto irrilevante secondo la meccanica quantistica minimale. Quest'ultima infatti non fa riferimento a singoli oggetti *reali*, ma soltanto ai risultati, statisticamente descritti, di esperimenti eseguiti secondo precise modalità: gli oggetti di tali esperimenti (atomi, elettroni, etc.) sono solo implicitamente definiti dalle relative osservabili, intese nel senso operativo del termine[10].

[10]Spingendo al limite questa argomentazione, si arriva piuttosto paradossalmente a negare l'esistenza stessa degli oggetti microscopici: l'uso di concetti quali "molecole",

Al contrario, una interpretazione di tipo *realistico* della meccanica quantistica richiede che il formalismo matematico della teoria faccia riferimento a sistemi fisici oggettivi, considerati singolarmente. Questo significa che anche la funzione d'onda, sebbene non direttamente osservabile, deve costituire una proprietà oggettiva del sistema fisico in esame. Come tale essa risulta costantemente associata al sistema ed è quindi necessario descriverne l'evoluzione anche durante il processo di misurazione. Questo costituisce il problema della teoria della misura in meccanica quantistica, a tutt'oggi fondamentalmente irrisolto. Va comunque ribadito che si tratta di un problema solo per una interpretazione realistica della meccanica quantistica: all'interno della descrizione minimale esso semplicemente non esiste.

Supponiamo allora che il sistema $\mathcal{S}$, al momento della misura della generica osservabile A mediante l'apparato sperimentale $\mathcal{A}$, si trovi nello stato puro $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$) e che $|\psi\rangle$ non sia un autovettore di A. Se l'esperimento è di prima specie ed a è il risultato osservato (si assuma per il momento che $\sigma(A)$ sia discreto e a non degenere), risulta naturale assumere che lo stato del sistema, *immediatamente dopo la misurazione*, sia l'autostato di A corrispondente all'autovalore a, cioè $\rho_a = |a\rangle\langle a|$[11]. Dopo tutto quanto appena descritto non è altro che una preparazione completa (si veda il §7.1). In un ulteriore esperimento, atto a misurare un'altra generica osservabile B, dovremo applicare le regole della meccanica quantistica, in particolare il postulato III, facendo riferimento allo stato ρ_a così preparato. Quindi l'effetto della prima osservazione è stato quello di cambiare lo stato ρ nello stato ρ_a. Tale processo prende comunemente il nome di *precipitazione* o *riduzione del pacchetto d'onda* e secondo le interpretazioni realistiche del formalismo della meccanica quantistica esso costituisce un fenomeno fisico oggettivo, da ascrivere all'interazione tra il sistema fisico $\mathcal{S}$ e l'apparato di misura $\mathcal{A}$. È proprio questo il punto in cui si manifesta l'indeterminismo della descrizione quantomeccanica dei fenomeni fisici: mentre l'evoluzione di Schroedinger è perfettamente deterministica, la riduzione del pacchetto d'onda è intrinsecamente acausale: la conoscenza dello stato iniziale ρ del sistema $\mathcal{S}$ non fissa univocamente quale autovalore a verrà osservato, per cui ripetizioni dello stesso esperimento forniscono risultati diversi, indipendentemente dall'accuratezza sperimentale.

"atomi" ed in genere "particelle", sarebbe solo una scorciatoia terminologica per indicare più o meno complesse caratteristiche degli apparati e delle procedure sperimentali, nonché delle relative rappresentazioni e manipolazioni matematiche, facendo comunque riferimento solo a stati classicamente descritti.

[11] Secondo Dirac questo è un inevitabile principio di continuità fisica: se lo stesso esperimento venisse ripetuto subito dopo, il risultato sarebbe certamente a. Queste considerazioni risultano particolarmente pregnanti se A è una costante del moto.

A questo punto le versioni realistiche della meccanica quantistica si diversificano, a seconda della descrizione dinamica assunta per l'apparato macroscopico $\mathcal{A}$ e la sua interazione con il sistema $\mathcal{S}$. Non è questo il luogo per addentrarsi in una tematica complessa e spinosa come quella del passaggio, all'interno della meccanica quantistica, dal mondo microscopico a quello macroscopico (si vedano ad esempio [**D'E71, WZ83, Omn94**]). Qui ci limitiamo a distinguere tra due linee fondamentalmente distinte. Nella prima si assume che la meccanica quantistica fornisca una descrizione completa del mondo fisico, inclusi gli oggetti macroscopici, che sono da considerare "semplicemente" come sistemi composti da moltissimi oggetti microscopici. Secondo questa linea di pensiero l'apparato di misura $\mathcal{A}$ è completamente descritto da un opportuno spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ e la sua dinamica è governata da un'opportuna, sebbene complicatissima, Hamiltoniana $\mathsf{H}_{\mathcal{A}}$, con relativa equazione di Schroedinger, proprio come il sistema $\mathcal{S}$ sotto esame. La misurazione di una osservabile A di $\mathcal{S}$ mediante $\mathcal{A}$ costituisce un particolare tipo di interazione tra $\mathcal{S}$ e $\mathcal{A}$, descritta da una Hamiltoniana $\mathcal{H}_{\mathcal{AS}}$ che agisce nel prodotto diretto dei due spazi di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{AS}} = \mathcal{H}_{\mathcal{A}} \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. I risultati dell'esperimento sono leggibili da cambiamenti macroscopici dello stato di $\mathcal{A}$ indotti da tale interazione. Il fatto che questi siano *oggettivamente* ben definiti (inaccuratezze sperimentali a parte), senza più alcuna traccia apparente della coerenza quantomeccanica propria dei sistemi microscopici, va attribuito alle particolari caratteristiche della dinamica dei sistemi macroscopici. Questo schema concettuale è senz'altro molto attraente, ma va detto che, nonostante molteplici tentativi più o meno validi, non ne esiste ancora una formulazione del tutto convincente. Si noti anche che in questa ottica non è lecito considerare una misurazione come un processo istantaneo, né assumere che due misurazioni possono essere arbitrariamente vicine nel tempo. Secondo l'altra linea di pensiero, la meccanica quantistica, almeno così come presentata sinora, sarebbe fondamentalmete incompleta, vuoi perché essa trascurerebbe certi gradi di libertà dei sistemi fisici (le cosiddette **variabili nascoste**) la cui completa conoscenza eliminerebbe ogni fattore di indeterminazione, vuoi perché l'equazione di Schroedinger sarebbe solo un'approssimazione lineare di equazioni del moto più complesse, capaci di interpolare in modo continuo tra il comportamento quantomeccanico degli oggetti microscopici e quello classico dei sistemi macroscopici. Nel seguito torneremo sulla tematica delle variabili nascoste, in relazione alle fondamentali *diseguaglianze di Bell*. Per il momento, facendo ricorso alle matrici densità ed alle famiglie spettrali, possiamo facilmente estendere il formalismo della riduzione del pacchetto d'onda al caso generale di un arbitrario stato iniziale ρ (puro o misto che sia) e di un'arbitraria osservabile A. Se ρ è lo stato del sistema all'istante t_0

della misurazione di A mediante un esperimento di prima specie, e viene osservato un risultato compreso nel sottoinsieme boreliano $\mathfrak{b}$, lo stato del sistema "immediatamente dopo" vale

$$\rho' = \frac{E_A(\mathfrak{b})\rho E_A(\mathfrak{b})}{\operatorname{Tr}\rho E_A(\mathfrak{b})} .$$

Questa espressione appare ovvia, se riguardiamo lo stato ρ' come stato iniziale di un successivo esperimento, preparato dalla misurazione di A: lo stato ρ viene *filtrato* in base a quanto si è effettivamente verificato. Infatti ρ' è per costruzione una somma convessa di autostati di A ed è propriamente normalizzata grazie al denominatore, che coincide con la probabilità $\Pr_A(\mathfrak{b})$ di osservare un valore di A compreso nel sottoinsieme $\mathfrak{b}$ (si noti che se $\Pr_A(\mathfrak{b})$ non può annullarsi, poiché per ipotesi viene effettivamente osservato un valore di A compreso in $\mathfrak{b}$). Se nel successivo esperimento viene misurata l'osservabile B all'istante t, la probabilità di osservarne un valore compreso in $\mathfrak{b}'$ si scrive, in base ai postulati III e IV:

$$\Pr_B(\mathfrak{b}') = \operatorname{Tr}\rho'(t)E_B(\mathfrak{b}') = \frac{\operatorname{Tr}U(t,t_0)E_A(\mathfrak{b})\rho E_A(\mathfrak{b})U(t,t_0)^\dagger E_B(\mathfrak{b}')}{\operatorname{Tr}\rho E_A(\mathfrak{b})} .$$

Ovvero, sfruttando la ciclicità della traccia,

$$\Pr_B(\mathfrak{b}') = \frac{\operatorname{Tr}\rho E_A(\mathfrak{b})E_{B(t)}(\mathfrak{b}')E_A(\mathfrak{b})}{\operatorname{Tr}\rho E_A(\mathfrak{b})} , \tag{7.100}$$

dove $B(t) = U(t,t_0)^\dagger B U(t,t_0)^\dagger$ rappresenta l'osservabile B nella descrizione di Heisenberg. La struttura di questa espressione è quella tipica di una probabilità condizionata, nella quale il numeratore va identificato con la **probabilità congiunta** $\Pr_{AB}(\mathfrak{b},t_0;\mathfrak{b}',t)$ che nell'esperimento complessivo, costituito dalla preparazione dello stato ρ (che in questo esempio consideriamo terminata all'istante t_0), dalla misurazione di prima specie dell'osservabile A allo stesso tempo t_0, dall'evoluzione indisturbata da t_0 a t ed infine dalla misurazione dell'osservabile B, i risultati per A e per B siano compresi rispettivamente nei sottoinsiemi boreliani $\mathfrak{b}$ e $\mathfrak{b}'$.

Quali che siano le implicazioni epistemologiche che si vogliano dare alla fondamentale formula (7.100), essa risulta sperimentalmente verificata. Possiamo quindi riguardare la meccanica quantistica minimale, con i suoi quattro fondamentali postulati, come un paradigma computativo capace di fare previsioni sorprendentemente accurate su esperimenti classicamente incomprensibili. Per coloro che si accontentano di questo, che non è poco, non ci sono problemi con la meccanica quantistica minimale, almeno fino ad oggi.

7.9.1. L'esperimento delle due fenditure. Nel §5.2.1 abbiamo accennato all'esperimento delle due fenditure. Vogliamo ora analizzarlo più accuratamente dal punto di vista dei fondamenti della meccanica quantistica esposti in questo capitolo. Lo scopo è quello di illustrare alcuni aspetti fondamentali della rappresentazione matematica delle operazioni di preparazione e misura.

L'esperimento si divide in tre momenti precisi. La prima fase, che sembra naturale definire di preparazione, consiste nella produzione di un fascio di particelle massive, ad esempio elettroni; questo fascio è per ipotesi stabile, ben collimato, quasi monocromatico ed orientato nella direzione $z > 0$. Nella seconda fase le particelle incidono su uno schermo posto in $z = 0$ e dotato di due fenditure f_+ e f_-, orientate lungo y e situate in $x = \pm d/2$. Infine nella terza fase le particelle vengono rivelate, tramite un particolare tipo di interazione, da una lastra fotografica posta in $z = L$ o da uno strumento analogo. Questa suddivisione è innanzitutto di tipo logico: noi possiamo considerare un esperimento costituito dalla sola produzione, uno costituito dalla produzione e rivelazione sulla lastra fotografica ed infine l'esperimento completo, nel quale lo schermo viene interposto fra la sorgente e la lastra. Appare naturale collegare questa suddivisione logica con quella temporale: le particelle sono prima emesse dalla sorgente, quindi interagiscono con lo schermo ed infine vengono rivelate sulla lastra. Inoltre è chiaro che la nostra informazione sulla fase di preparazione discende da rivelazioni successive (la stessa rivelazione fotografica e/o rivelazioni di altro tipo). Sono proprio queste ultime ad insegnarci che il fascio è composto da particelle, ciascuna delle quali determina una singola macchia sulla lastra. Si noti infine che, nel suo complesso, l'esperimento è di *seconda specie* (vedi §7.1): esso si conclude con la "distruzione" delle particelle rivelate tramite le macchie sulla lastra.

La grandezza fisica misurata nell'esperimento è la distribuzione delle macchie sulla lastra fotografica, definita come la frazione delle macchie in una piccola area centrata nel punto (x, y). Più precisamente, dato che il processo in questione è di tipo stazionario, nel senso descritto al §7.7.3, la grandezza misurata è il flusso di particelle attraverso l'areola centrata in (x, y). Il rapporto tra quest'ultimo ed il flusso totale, cioè la densità di flusso $F(x, y)$, coincide con la probabilità per unità di tempo di rivelare in (x, y) una data, singola particella, a patto di considerare l'esperimento nel suo complesso come la ripetizione di un identico esperimento "elementare" che coinvolge una sola particella alla volta. Questa interpretazione risulta naturale se consideriamo fasci di debolissima intensità e, in particolar modo, se teniamo conto che la stessa figura di interferenza si ottiene ricomponendo i risultati di esperimenti parziali condotti, nelle stesse condizioni, in tempi e luoghi diversi.

La meccanica quantistica, attraverso il postulato III, ci fornisce un modo per calcolare $F(x, y)$ come valor medio di un'opportuna osservabile $J(x, y)$ in un opportuno stato ρ che si suppone descrivere una particella del fascio:

$$F(x, y) = \mathrm{Tr}\, \rho\, J(y, z) \,. \tag{7.101}$$

Il primo problema è quindi quello di rappresentare $J(x, y)$ come operatore autoaggiunto nello spazio di Hilbert della particella. Abbiamo $J(x, y) = J_z(x, y, L)$ dove

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \tfrac{1}{2}\,(\boldsymbol{v}\,|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}| + |\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|\,\boldsymbol{v}) \;,$$

e $\boldsymbol{v} = \mathbf{p}/m$ è l'operatore velocità. Si tratta della traduzione quantomeccanica diretta della nozione classica di corrente per una particella: essa è concentrata nella posizione della particella ed ivi coincide con la velocità. Possiamo verificare subito che, per uno stato puro $|\psi\rangle\langle\psi|$, nella rappresentazione della posizione si ottiene

$$\mathrm{Tr}\; |\psi\rangle\langle\psi|\, \mathbf{J}(\mathbf{x}) = \frac{\hbar}{m}\, \mathfrak{Im}\left[\overline{\psi(\mathbf{x})}\nabla\psi_k(\mathbf{x})\right] \equiv \mathbf{j}(\mathbf{x}) \;, \tag{7.102}$$

che è proprio la corrente di probabilità introdotta in §5.2.6.

Il secondo passo consiste ora nella determinazione di ρ.

Osservazione *[]Considerando la fase di preparazione, nel senso preciso specificato in §7.1, terminata con l'ottenimento del fascio incidente sullo schermo, stiamo in pratica trattando l'esperimento delle due fenditure come un problema di scattering (vedi cap. 12), con lo schermo facente le funzioni di potenziale. Potremmo allora riassumere l'interazione di una particella con lo schermo affermando che la porzione di spazio materialmente occupata dallo stesso risulta più o meno preclusa alla particella, mentre nella parte di spazio complementare essa si muove in assenza di forze secondo l'equazione libera di Schroedinger. Per la precisione dovremmo specificare se le particelle sono assorbite o riflesse dallo schermo (o se entrambe le eventualità possono verificarsi e con quale ampiezza di probabilità relativa). In funzione di questa precisazione potremmo allora modellizzare la forma del potenziale corrispondente allo schermo; ad esempio un potenziale infinitamente repulsivo corrisponde alle condizioni di riflessione perfetta, mentre un potenziale con una parte immaginaria può simulare l'assorbimento delle particelle. Questi aspetti sono rilevanti se vogliamo studiare la probabilità di trasmissione, riflessione ed assorbimento, ma riguardano assai poco la questione che qui ci interessa, che consiste nel fenomeno di interferenza osservato sulla lastra fotografica. Evidentemente le particelle che contano sono quelle che hanno superato*

lo schermo attraversando le fenditure[12]*, per cui possiamo considerare terminata la fase di preparazione solo per queste ultime e riferire ad esse lo stato quantomeccanico* ρ*.*

Il processo complessivo, essendo stazionario, è descritto da una matrice di densità del tipo (7.92). Per quanto vogliamo qui illustrare possiamo trascurare i numeri quantici τ (il che equivale ad assumere che ρ sia una somma incoerente anche su τ, senza coerenze residue). In assenza dello schermo le autofunzioni $\langle x|\omega\rangle$ dell'energia sono proporzionali alle onde piane e^{ikz}, con $k > 0$ e $\omega = \hbar k^2/2m$. La presenza dello schermo cambia la dipendenza da z ed introduce una dipendenza da x e y, ma resta valida la relazione tra ω e k.

In definitiva, dobbiamo risolvere l'equazione libera di Schroedinger agli stati stazionari con energia $E = \hbar^2 k^2/2m$, ovvero l'equazione di Helmholtz

$$(\triangle + k^2)\psi = 0 \,.$$

Si tratta di un problema di diffrazione tipico dell'ottica ondulatoria: calcolare l'ampiezza ψ nella porzione di spazio tra lo schermo e la lastra, sapendo che un'onda piana monocromatica incide a sinistra sullo schermo. Le condizioni al contorno vanno assegnate sul piano $z = 0$ (possiamo assumere che lo schermo sia in pratica illimitato), nonché "all'infinito". Sulla porzione di piano fisicamente occupata dallo schermo assumiamo condizioni di Neumann, cioè $\partial\psi/\partial z = 0$, mentre sulla porzione di piano corrispondente alle fenditure poniamo $\partial\psi/\partial z = ik$, che è il valore ivi assunto dall'onda piana incidente (si tratta di una buona approssimazione per calcolare ψ lontano dallo schermo). "All'infinito" abbiamo la condizione di radiazione, la quale richiede che ψ decada almeno come r^{-1}.

Il teorema di Helmholtz-Kirchhoff-Green dell'ottica ondulatoria fa il resto: la funzione d'onda vale

$$\psi = \psi_+ + \psi_- \,,$$

dove

$$\psi_\pm(x,y,z) = -i\,k \int_{f_\pm} dx'dy'\; G(x,y,z;x',y',0)$$

[12]Non ci si lasci confondere dal linguaggio adottato, che fa liberamente uso di termini come quello stesso di "particella", o di espressioni come "muoversi" e "passare attraverso". Esso inevitabilmente suggerisce l'idea di traiettoria, e quindi di un passaggio che avviene attraverso *l'una o l'altra* delle fenditure. Ma in assenza di rivelatori in grado di segnalarci la presenza di una particella in prossimità di una fenditura in un certo intervallo di tempo, questa conclusione è priva di fondamento: per ipotesi, noi abbiamo rinunciato a rivelare le particelle se non con la lastra fotografica.

e G è la funzione di Green che soddisfa alle condizioni di Neumann su tutto il piano $z = 0$. Con il consueto metodo delle immagini si ottiene

$$\psi_\pm(x, y, L) \simeq \frac{-ia\,k}{2\pi} \int_{-b/2}^{b/2} dy' \, \frac{e^{ikR_\pm}}{R_\pm} \, ,$$

dove $R_\pm^2 = (x \mp d/2)^2 + (y - y')^2 + L^2$ ed a è la larghezza delle fenditure, che possiamo assumere molto più piccola delle altre lunghezze in gioco. Si noti che $\psi_\pm$ non è normalizzabile rispetto alle variabili x e y, dato che in un processo stazionario l'integrale di $|\psi_\pm|^2$ rappresenta comunque il risultato di un esperimento di durata infinita. Al contrario la densità di flusso è normalizzabile, dato che il flusso complessivo attraverso le due fenditure è finito. Introduciamo allora dei vettori di stato "solo rispetto a (y, z)"

$$\langle x, y | \psi_\pm \rangle = C_0 \, \psi_\pm(x, y, L) \, ,$$

dove C_0 è la costante di normalizzazione (la stessa per entrambi gli stati) del flusso totale

$$J = \int dx dy \, J(x, y)$$

$$F = \langle \psi_\pm | \, J \, | \psi_\pm \rangle = C_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, dy \, \mathfrak{Im} \left[\overline{\psi_\pm(x, y, L)} \frac{\partial}{\partial z} \psi_\pm(x, y, L) \right] = 1 \, .$$

Ritornando ora alla determinazione dello stato ρ, assumiamo per semplicità il limite di un fascio strettamente monocromatico; la situazione reale corrisponde ad una somma incoerente di situazioni ideali di questo tipo, ma non introduce modifiche sostanziali: se $F(x, y; \omega)$ è la densità di flusso per un fascio monocromatico di frequenza $\omega = \hbar k^2/2m$, allora

$$F(x, y) = \int d\omega \, w(\omega) \, F(x, y; \omega)$$

(somma incoerente! Vedi Eq. (7.92)) è la densità di flusso per un fascio con dispersione $w(\omega)$. Si noti comunque che la dispersione in energia tende a offuscare il fenomeno di interferenza.

Supponiamo inizialmente che solo una delle due fenditure sia aperta. Allora il sistema, inteso come una singola particella incidente sulla lastra fotografica, è descritto dallo stato puro $|\psi_\pm\rangle\langle\psi_\pm|$ e la densità di flusso $F_\pm(x, y)$ si calcola come in (7.102). Se entrambe le fenditure sono aperte, lo stato è ancora puro

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \, , \quad |\psi\rangle = \tfrac{1}{2} |\psi_+\rangle + \tfrac{1}{2} |\psi_-\rangle \, , \tag{7.103}$$

e dobbiamo sempre applicare la (7.102). Il fattore $1/2$ in Eq. (7.103) serve a mantenere la normalizzazione $\mathrm{Tr}\, \rho J = 1$: si noti che anche i termini misti, contenenti sia $|\psi_+\rangle$ che $|\psi_-\rangle$, contribuiscono al flusso totale, dato che

$$\mathfrak{Re} \, \langle \psi_+ | \, J \, | \psi_- \rangle = \langle \psi_\pm | \, J \, | \psi_\pm \rangle \, .$$

Il modo più rapido per verificare questa relazione sfrutta il fatto che, per la conservazione del flusso, l'integrale di $F(x,y)$ non può dipendere da b e può quindi essere valutato nel limite $b \to 0$, ovvero $\psi_+ \to \psi_-$ (in realtà il limite inferiore di b è la larghezza delle fenditure a, ma nella nostra approssimazione $a \to 0$).

La densità di flusso $F(x,0)$ presenta (per x non troppo grandi e kd di ordine 1) la classica figura di interferenza dovuta alla sovrapposizione coerente di $|\psi_+\rangle$ e $|\psi_-\rangle$, così come qualitativamente descritto nel §5.2.1. Per $L \gg x, d, b$ possiamo approssimare ulteriormente $\psi_\pm(x,0,L)$ come

$$\psi_\pm(x,0,L) \simeq \frac{-ia\,b\,k}{2\pi L}\,\frac{\exp\{ik\left[L + (x \mp d/2)^2/2L\right]\}}{1 + (x \mp d/2)^2/2L^2}\,, \tag{7.104}$$

per cui, all'ordine più basso che mantiene l'integrabilità in y,

$$F(x,0) \simeq F(0,0)\left[\frac{1 + \frac{1}{8}(d/L)^2}{1 + (x/L)^2 + \frac{1}{8}(d/L)^2}\right]^{3/2} \cos^2\left(kd\frac{x}{2L}\right)\,.$$

Supponiamo ora di avere a disposizione un tipo particolare di rivelatore $\mathcal{R}$, in grado di segnalare il passaggio di una particella in una data regione dello spazio senza assorbirla né perturbarne il moto in modo apprezzabile. Queste qualità possono essere verificate interponendo $\mathcal{R}$ tra sorgente e lastra, senza lo schermo con le fenditure, e confrontando i risultati (numero complessivo e distribuzione delle macchie) con la situazione in cui il rivelatore è assente. Posizioniamo quindi il rivelatore a ridosso di una delle fenditure, diciamo f_+, tra schermo e lastra, e ripetiamo l'esperimento (si tratta di una situazione ideale nel caso degli elettroni, dato che la distanza tra le due fenditure, dell'ordine della lunghezza di De Broglie, è generalmente troppo piccola per un rivelatore reale; tuttavia esperimenti concettualmente equivalenti sono possibili con geometrie ed apparati diversi e con particolari specie di particelle).

Se $\mathcal{R}$ è efficiente, esso "scatta" circa metà delle volte, nel senso che si verifica una correlazione tra i "clicks" del contatore e metà delle macchie.

D'altra parte, si osserva che la figura d'interferenza scompare.

La distribuzione delle macchie sulla lastra assume ora la forma

$$F(x,y) = \tfrac{1}{2}\,\left[F_+(x,y) + F_-(x,y)\right]$$

ed è ancora correttamente normalizzata in quanto descrive sia le macchie correlate con i "clicks" sia quelle anti-correlate. Nella zona di nostro interesse vale l'approssimazione

$$\begin{aligned} F(x,0) \simeq\ & \tfrac{1}{2}F(0,0)\left[1 + \tfrac{1}{8}(d/L)^2\right] \times \\ & \left\{\left[1 + \frac{(x - d/2)^2}{L^2}\right]^{-3/2} + \left[1 + \frac{(x + d/2)^2}{L^2}\right]^{-3/2}\right\}\,, \end{aligned}$$

da confrontarsi con la (7.104). La meccanica quantistica minimale "spiega" il fenomeno nel seguente modo. Con l'introduzione del rivelatore l'esperimento è cambiato e dobbiamo quindi determinare nuovamente lo stato ρ che utilizzeremo per calcolare $F(x, y)$. Il rivelatore funziona esattamente come in un esperimento di prima specie: esso prepara il sistema (una data particella) in uno dei due stati puri $|\psi_\pm\rangle\langle\psi_\pm|$, "filtrando" l'insieme statistico descritto da $|\psi\rangle\langle\psi|$. Nel linguaggio corrente si dice che esso "riduce" o "precipita" lo stato puro $|\psi\rangle\langle\psi|$ in una miscela statistica

$$|\psi\rangle\langle\psi| \longrightarrow \tfrac{1}{2}\,|\psi_+\rangle\langle\psi_+| + \tfrac{1}{2}\,|\psi_-\rangle\langle\psi_-| \ .$$

Essa descrive due situazioni mutuamente esclusive: la particella o passa attraverso f_+, con probabilità $1/2$, o passa attraverso f_-, sempre con probabilità $1/2$.

La più diretta interpretazione realistica della meccanica quantistica vorrebbe riguardare questa riduzione come un fenomeno fisico vero e proprio che si verifica al momento del passaggio di una data particella attraverso il rivelatore $\mathcal{R}$. Esso sarebbe causato dalle particolari proprietà del rivelatore stesso (che quando scatta subisce una transizione di stato macroscopica ed irreversibile) e della sua interazione con la particella. Questa interpretazione ha però svariati difetti. Innanzitutto, lo stesso fenomeno fisico dovrebbe verificarsi anche quando, in circa metà degli eventi "elementari", $\mathcal{R}$ non scatta e quindi non avviene alcuna transizione macroscopica ed irreversibile. In secondo luogo, considerando la riduzione come una proiezione del vettore di stato da $|\psi\rangle$ alla sua componente lungo $|\psi_+\rangle$ o $|\psi_-\rangle$, avremmo a che fare con una transizione non unitaria e quindi non descrivibile all'interno della meccanica quantistica. Si noti in particolare che questa visione contrasta con l'osservazione sperimentale che il flusso totale delle particelle è lo stesso con o senza il rivelatore.

Esiste una spiegazione a prima vista elementare della questione, capace di conciliare da un lato il radicale effetto dell'introduzione di $\mathcal{R}$ e dall'altro l'esigenza che esso vada considerato alla stregua di un qualsiasi sistema fisico, descrivibile in linea di principio all'interno della meccanica quantistica. L'idea è la seguente.

La caratteristica fondamentale di $\mathcal{R}$ è di interagire con la particella $\mathcal{S}$ in modo tale da transire certamente da uno stato $|0\rangle\langle 0|$ ad uno stato $|1\rangle\langle 1|$, osservabilmente distinto da $|0\rangle\langle 0|$ e quindi ad esso ortogonale. Ora, se la fenditura f_- è chiusa, lo stato complessivo del sistema composto $\mathcal{S} \cup \mathcal{R}$, rilevante per le misurazioni di $|y\rangle\langle y|$ sulla lastra fotografica, vale senz'altro $|\psi_+\rangle\langle\psi_+| \otimes |1\rangle\langle 1|$. Se f_+ è chiusa, allora lo stato complessivo vale senz'altro $|\psi_+\rangle\langle\psi_+| \otimes |0\rangle\langle 0|$ (abbiamo tacitamente assunto $\langle 0|0\rangle = \langle 1|1\rangle = 1$). In entrambi i casi il rivelatore non ha alcun effetto sulle osservazioni di $J(x, y)$, che è un'osservabile del solo sistema $\mathcal{S}$.

Se entrambe le fenditure sono aperte, lo stato di $\mathcal{S} \cup \mathcal{R}$ deve essere, per via del principio di sovrapposizione lineare

$$\rho = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\psi_+\rangle \otimes |1\rangle + |\psi_-\rangle \otimes |0\rangle\Big)\Big(\langle\psi_+| \otimes \langle 1| + \langle\psi_-| \otimes \langle 1|\Big) .$$

Si tratta ancora di uno stato puro, nel quale però esiste una ben precisa correlazione tra il vettore di stato del rivelatore e quello della particella. La diversa normalizzazione rispetto all'Eq. (7.103) è dovuta al fatto che $|\psi_+\rangle \otimes |1\rangle$ è ortogonale a $|\psi_-\rangle \otimes |0\rangle$. È proprio l'ortogonalità di $|0\rangle$ e $|1\rangle$ a determinare la "riduzione": infatti, dato che $J(x,y)$ agisce come l'identità rispetto a $\mathcal{R}$, abbiamo

$$\begin{aligned} F(x,y) = \operatorname{Tr} \rho J(x,y) &= \tfrac{1}{2}\big(\langle\psi_+| J(x,y) |\psi_+\rangle \langle 1|1\rangle + \langle\psi_-| J(x,y) |\psi_-\rangle \langle 0|0\rangle \\ &\quad + \langle\psi_-| J(x,y) |\psi_+\rangle \langle 0|1\rangle + \langle\psi_+| J(x,y) |\psi_-\rangle \langle 1|0\rangle\big) \\ &= \tfrac{1}{2} F_+(y,0) + \tfrac{1}{2} F_-(y,0) \\ &= \operatorname{Tr} \left(\tfrac{1}{2} |\psi_+\rangle\langle\psi_+| + \tfrac{1}{2} |\psi_-\rangle\langle\psi_-|\right) J(x,y) . \end{aligned}$$

Alcune osservazioni sono necessarie per evitare di considerare troppo banale questo risultato. Innanzitutto, anche se equivalente alla miscela statistica propria della riduzione per quanto riguarda le osservabili del solo $\mathcal{S}$, lo stato ρ *è ancora uno stato puro*: esso continua a contenere tutte le coerenze quantomeccaniche che darebbero luogo a fenomeni di interferenza nella misurazione di opportune osservabili non banali anche su $\mathcal{R}$. In secondo luogo, non è affatto facile dimostrare che la transizione che avviene nel rivelatore sia una conseguenza dell'evoluzione quantomeccanica unitaria governata dalla Hamiltoniana complessiva, che tenga conto dell'interazione tra $\mathcal{R}$ e $\mathcal{S}$ e delle caratteristiche interne di $\mathcal{R}$.

Non è comunque questo il luogo per addentrarci oltre in una tematica difficile e spinosa, dove spesso la fisica viene persa di vista a favore della filosofia (per approfondimenti si veda per esempio [**WZ83**]). Conviene solo notare come la "spiegazione" appena fornita del meccanismo di riduzione porti ad una visione della natura piuttosto curiosa, dove le interazioni passate con oggetti lontani nel tempo e nello spazio vanno sempre incluse nella descrizione degli eventi attuali: lo schermo ed il rivelatore potrebbero essere molto lontani dalla lastra fotografica, rendendo piuttosto misterioso l'utilizzo dello stato complessivo di $\mathcal{S} \cup \mathcal{R}$ per calcolare una probabilità relativa al solo sistema $\mathcal{S}$. Nel prossimo paragrafo esamineremo un'altra straordinaria istanza di questo aspetto intrinsicamente "non-locale" della meccanica quantistica.

7.9.2. Diseguaglianze di Bell. Consideriamo un sistema fisico $\mathcal{S}$ composto da due sottosistemi $\mathcal{S}_1$ e $\mathcal{S}_2$, ed una coppia di strumenti in

grado di misurare separatamente osservabili dell'uno o dell'altro sottosistema. Per gli scopi della presentazione non è necessario fare riferimento a sistemi fisici concreti, ma tale scelta rende più immediata l'esposizione. Parleremo quindi di particelle dotate di spin 1/2 (vedi al §8.2.2) e di apparati di Stern-Gerlach vedi al §5.1.6). Si noti comunque che non abbiamo affatto bisogno della teoria quantomeccanica del momento angolare per definire operativamente una particella di spin 1/2. Una tale particella è semplicemente il corpuscolo, per ipotesi dotato di un momento magnetico, di un fascio che viene suddiviso in due da un apparato di Stern-Gerlach; l'osservabile *spin* (opportunamente normalizzata) vale $+1$ per tutti i corpuscoli di un sottofascio e -1 per quelli dell'altro. Per misurare lo spin di una data particella, dobbiamo prepararla in modo che passi attraverso un apparato di Stern-Gerlach e quindi rivelarla su una o l'altra delle due direzioni. Inoltre, come sappiamo, la stessa situazione si ripropone per ogni orientazione dell'apparato, per cui esiste un'osservabile spin per ogni orientazione.

Torniamo ora al sistema composto, e denotiamo con $\mathbf{a}$ e $\mathbf{b}$, rispettivamente, i versori che individuano le orientazioni dei due apparati. Sia inoltre A l'osservabile "spin di $\mathcal{S}_1$ relativa all'orientazione $\mathbf{a}$" ed analogamente B quella di $\mathcal{S}_2$. Si noti che esse sono reciprocamente compatibili.

L'esperimento in questione consiste nella preparazione ripetuta di $\mathcal{S}$ in un certo stato, da una fase di evoluzione indisturbata e di durata variabile e quindi da una misurazione di A e B in regioni di spazio arbitrariamente lontane. Evidentemente la dinamica e le condizioni sperimentali sono tali per cui la particella $\mathcal{S}_1$ attraversa un apparato e la particella $\mathcal{S}_2$ attraversa l'altro in almeno alcune delle ripetizioni. Noi siamo interessati in questi casi soltanto e vogliamo studiare le correlazioni tra l'osservazione di un certo valore per A da una parte e di B dall'altra al variare delle orientazioni $\mathbf{a}$ e $\mathbf{b}$.

Supponiamo ora che i valori misurati di A e B dipendano, oltre che dalle orientazioni $\mathbf{a}$ e $\mathbf{b}$ dei magneti, anche da un insieme di parametri, che raccogliamo in un unico simbolo λ, e che rappresentano tutte le condizioni rilevanti ma ignote dell'esperimento. L'ipotesi fondamentale che vogliamo mettere alla prova è se possono esistere delle funzioni $A(\mathbf{a},\lambda) = \pm 1$ e $B(\mathbf{b},\lambda) = \pm 1$ che rappresentano le osservabili A e B. Si tratta cioè di tentare una descrizione classica, deterministica e *locale* dell'esperimento. In una descrizione *non locale* dovremmo ammettere anche funzioni della forma $A(\mathbf{a},\mathbf{b},\lambda)$ e $B(\mathbf{a},\mathbf{b},\lambda)$: esse implicherebbero una dipendenza di quanto osservato da una parte dalle scelte fatte dall'altra parte, che potrebbe essere distante anni-luce.

Poiché non sappiamo nulla sui valori assunti dalle **variabili nascoste** λ, che possono cambiare da una osservazione all'altra, dobbiamo fare una media su di essi. Sia $f(\lambda)$ la distribuzione di probabilità, comunque ignota, di λ. Allora, per fissate orientazioni, la correlazione tra A e B si scrive

$$C(\mathbf{a},\mathbf{b}) = \int d\lambda\, f(\lambda)\, A(\mathbf{a},\lambda) B(\mathbf{b},\lambda)\,. \tag{7.105}$$

Ora consideriamo altre due orientazioni $\mathbf{a}', \mathbf{b}'$ e calcoliamo

$$\begin{aligned} C(\mathbf{a},\mathbf{b}) - C(\mathbf{a},\mathbf{b}') &= \int d\lambda\, f(\lambda) \left[A(\mathbf{a},\lambda)B(\mathbf{b},\lambda) - A(\mathbf{a},\lambda)B(\mathbf{b}',\lambda)\right] \\ &= \int d\lambda\, f(\lambda) A(\mathbf{a},\lambda)B(\mathbf{b},\lambda)\left[1 \pm A(\mathbf{a}',\lambda)B(\mathbf{b}',\lambda)\right] \\ &\quad - \int d\lambda\, f(\lambda) A(\mathbf{a},\lambda)B(\mathbf{b}',\lambda)\left[1 \pm A(\mathbf{a}',\lambda)B(\mathbf{b},\lambda)\right]\,. \end{aligned}$$

Dato che $|A(\mathbf{a},\lambda)| = 1 = |B(\mathbf{b},\lambda)|$ e $f(\lambda)$ è per definizione nonnegativa e normalizzata, otteniamo ora

$$\begin{aligned} |C(\mathbf{a},\mathbf{b}) - C(\mathbf{a},\mathbf{b}')| &\le \int d\lambda\, f(\lambda)\left[1 \pm A(\mathbf{a}',\lambda)B(\mathbf{b}',\lambda)\right] \\ &\quad + \int d\lambda\, f(\lambda)\left[1 \pm A(\mathbf{a}',\lambda)B(\mathbf{b},\lambda)\right] \\ &= 2 \pm \left[C(\mathbf{a}',\mathbf{b}') + C(\mathbf{a}',\mathbf{b})\right]\,, \end{aligned}$$

ovvero

$$|C(\mathbf{a},\mathbf{b}) - C(\mathbf{a},\mathbf{b}')| + |C(\mathbf{a}',\mathbf{b}) + C(\mathbf{a}',\mathbf{b}')| \le 2\,.$$

Queste sono note come **diseguaglianze di Bell**. Dato che queste diseguaglianze sono state derivate senza fare alcun riferimento alla meccanica quantistica, non è affatto detto che la meccanica quantistica le rispetti. Supponiamo che il sistema $\mathcal{S}$ sia una particella di spin 0, nel senso che non venga deflessa dall'apparato di Stern-Gerlach, per qualunque orientazione dei magneti. Supponiamo inoltre che $\mathcal{S}$ possa "decadere" nella coppia $\mathcal{S}_1$, $\mathcal{S}_2$ di particelle di spin 1/2. Questo è proprio il processo descritto sopra. Nel cap. 8 vedremo che lo stato di spin 0 ottenuto componendo due sistemi di spin 1/2 ha la precisa espressione

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|+\rangle \otimes |-\rangle - |-\rangle \otimes |+\rangle\big)\,,$$

in termini degli stati $|\pm\rangle$ delle due particelle $\mathcal{S}_1$ e $\mathcal{S}_2$. $|+\rangle$ è lo stato delle particelle che vengono deflesse da una parte, e $|-\rangle$ quello delle particelle deflesse dall'altra, da un apparato di Stern-Gerlach orientato in un certo modo. L'orientazione precisa non conta, dato che $|0,0\rangle$ descrive uno stato *invariante per rotazioni* (vedi cap. 8).

Calcoliamo ora esplicitamente il correlatore $C(\mathbf{a},\mathbf{b})$ secondo le regole della meccanica quantistica. Le osservabili A e B sono rappresentate

rispettivamente dagli operatori $\mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ e $\mathbf{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}$, dove $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ è la terna delle **matrici di Pauli** che agiscono come

$$\sigma_x|\pm\rangle = |\mp\rangle\ , \quad \sigma_y|\pm\rangle = \pm i|\mp\rangle \ \text{ e } \ \sigma_z|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle \tag{7.106}$$

sugli stati delle particelle $\mathcal{S}_1$ e $\mathcal{S}_2$. L'asse z è per definizione quello definito da uno dei due apparati di Stern-Gerlach. La scelta è irrilevante poiché $\mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ e $\mathbf{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ sono operatori scalari, invarianti per rotazione. Con le regole (7.106) otteniamo subito

$$C(\mathbf{a},\mathbf{b}) = \langle 0,0|\,\mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}\otimes\mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,|0,0\rangle = -\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\ .$$

Ponendo $\mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = \cos\theta$ e scegliendo $\mathbf{a}' = \mathbf{b}$ e $\mathbf{b}' = 2(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})\mathbf{b} - \mathbf{a}$, per cui $\mathbf{a}'\cdot\mathbf{b} = 1$, $\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}' = \cos 2\theta$ e $\mathbf{a}'\cdot\mathbf{b}' = \cos\theta$, le diseguaglianze di Bell imporrebbero

$$|\cos\theta - \cos 2\theta| + |\cos\theta + 1| \le 2\ ,$$

ovvero

$$2\cos\theta - \cos 2\theta \le 1\ .$$

per qualunque valore di θ compreso tra 0 e $\pi/2$. Ma questo è palesemente falso per un intero intervallo centrato in $\theta = \pi/3$.

Dunque le diseguaglianze di Bell sono violate dalla meccanica quantistica e l'evidenza sperimentale punta decisamente dalla parte della meccanica quantistica [**ADR82**].

Si noti che le ipotesi sotto le quali le diseguaglianze sono state derivate possono essere ulteriormente "alleggerite". Infatti possiamo anche evitare di assumere il determinismo esatto secondo il quale le osservabili A e B assumono un valore definito non appena $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ e λ sono fissate. Supponiamo allora che esistano due algoritmi indipendenti di arbitraria natura per calcolare i valori medi $\langle A\rangle = \bar{A}(\mathbf{a},\lambda)$ e $\langle B\rangle = \bar{B}(\mathbf{b},\lambda)$ a partire da una data rappresentazione matematica delle osservabili A e B. Ad esempio, in una descrizione di tipo classico, potremmo separare dall'insieme di tutte le variabili nascoste quelle pertinenti alla sola osservazione di A, che denotiamo brevemente con λ_1, e quelle pertinenti alla sola osservazione di B, denotate con λ_2; potremmo quindi introdurre due distribuzioni di probabilità indipendenti $f_1(\mathbf{a},\lambda_1)$ e $f_2(\mathbf{b},\lambda_2)$ per il verificarsi di $A = +1$ o $A = -1$ e di $B = +1$ o $B = -1$, per cui avremmo

$$\bar{A}(\mathbf{a},\lambda) = \int d\lambda_1\, f_1(\mathbf{a},\lambda_1) A(\mathbf{a},\lambda_1,\lambda)\ ,$$

con un'espressione analoga per B. In una descrizione di tipo quantomeccanico avremmo regole diverse per calcolare i valori medi, ma in generale la nozione più intuitiva di *località* richiede comunque che $\langle A\rangle$ non possa dipendere da $\mathbf{b}$ e viceversa.

Dunque l'espressione (7.105) per il correlatore si generalizza subito alla

$$C(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \int d\lambda\, f(\lambda)\, \bar{A}(\mathbf{a}, \lambda)\, \bar{B}(\mathbf{b}, \lambda)\ . \tag{7.107}$$

Ma dato che i valori osservati di A e B sono ± 1, i rispettivi valori medi sono numeri con modulo minore o al più eguale ad uno e la dimostrazione precedente continua a valere senza necessità di modifiche.

In conclusione, la nozione di località che sottende alla (7.107) è in contrasto con la meccanica quantistica: il fatto che i due sistemi fisici $\mathcal{S}_1$ e $\mathcal{S}_2$ fossero un tempo strettamente legati in un sistema composto $\mathcal{S}$ continua a far sentire i propri effetti anche quando $\mathcal{S}_1$ e $\mathcal{S}_2$ sono spazialmente separati a distanze arbitrarie.

CAPITOLO 8

Momento angolare

Track 2

Osservazione *[]***Una trattazione più elementare si può trovare in Appendice C**

.

La trattazione del momento angolare riveste un ruolo particolarmente importante nel formalismo della meccanica quantistica. In primo luogo essa presenta un ulteriore notevolissimo esempio di due fenomeni tipici della meccanica quantistica: la non compatibilità di osservabili fondamentali classicamente compatibili, e la discretizzazione del loro spettro, classicamente continuo. In secondo luogo certe caratteristiche salienti della meccanica quantistica trovano esempi paradigmatici proprio nelle proprietà del momento angolare, grazie alla semplificazione fornita dalla natura discreta, o addirittura finita, dello spettro di ciascuna componente. Infine, anche se non certo per importanza, lo studio del momento angolare, specie in relazione con le rotazioni dello spazio fisico $\mathbb{R}^3$, costituisce un esempio fondamentale dello straordinario ruolo svolto in meccanica quantistica dalla teoria dei gruppi e delle loro rappresentazioni. Questo aspetto verrà trattato in modo generale nel prossimo capitolo, cui rimandiamo anche per ulteriori approfondimenti sulle rotazioni e sul momento angolare.

8.1. Momento angolare orbitale

Secondo la meccanica classica, un punto materiale localizzato in $\mathbf{x}$ con momento lineare $\mathbf{p}$ possiede un momento angolare *orbitale*

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{p} \,. \tag{8.1}$$

In effetti, per un punto materiale $\mathbf{L}$ coincide con il momento angolare totale $\mathbf{J}$, inteso come funzione generatrice delle trasformazioni canoniche corrispondenti alle rotazioni dello spazio fisico $\mathbb{R}^3$. Per una collezione di punti materiali possiamo invece distinguere tra il momento angolare orbitale dell'intera collezione, $\mathbf{L} = \mathbf{X} \wedge \mathbf{P}$, dove $\mathbf{X}$ è la posizione del centro di massa e $\mathbf{P}$ il momento totale, e il momento angolare *interno*

$$\mathbf{M} = \sum_n (\mathbf{x}_n - \mathbf{X}) \wedge \mathbf{p}_n \,. \tag{8.2}$$

$\mathbf{M}$ coincide con la somma dei momenti angolari orbitali di ciascuna particella misurati relativamente al centro di massa del sistema. Per costruzione $\mathbf{L} + \mathbf{M} = \mathbf{J}$. Com'è noto, considerazioni analoghe valgono nel caso dei mezzi continui e dei campi, quali quello elettromagnetico e gravitazionale.

Consideriamo ora la descrizione quantomeccanica di un singolo punto materiale. Come sappiamo, essa consiste nel promuovere x_μ e p_μ, $\mu = (1,2,3) = (x,y,z)$, ad operatori autoaggiunti nello spazio di Hilbert degli stati, con regole di commutazione canoniche $[x_\mu, p_\nu] = i\hbar\,\delta_{\mu\nu}$. Sappiamo anche che alle osservabili classiche, cioè alle funzioni a valori reali $A(\mathbf{x},\mathbf{p})$ vengono a corrispondere, in generale, diversi operatori autoaggiunti, e quindi diverse osservabili quantomeccaniche. Questo costituisce il problema dell'ordinamento già discusso nel §5.2.3 e §7.8. Le tre componenti del momento angolare orbitale

$$L_\mu = \epsilon_{\mu\nu\rho} x_\nu p_\rho \tag{8.3}$$

ovvero

$$L_x = y p_z - z p_y\,, \quad L_y = z p_x - x p_z\,, \quad L_z = x p_y - y p_x\,,$$

non soffrono di alcun problema di ordinamento, per cui risulta naturale (principio di corrispondenza) identificare in $\mathbf{L}$ anche il **momento angolare orbitale** quantomeccanico. Come vedremo nei prossimi paragrafi, si tratta di una identificazione naturale in base al ruolo di generatore delle rotazioni rivestito dal momento angolare.

Una conseguenza immediata della relazione (8.1) è un nuovo principio di indeterminazione: non è più possibile attribuire simultaneamente un valore esatto a più di una componente di $\mathbf{L}$. Infatti le tre componenti L_x, L_y e L_z non sono osservabili compatibili, ma soddisfano alle regole di commutazione

$$[L_x, L_y] = i\hbar\, L_z\,, \quad [L_z, L_x] = i\hbar\, L_y\,, \quad [L_y, L_z] = i\hbar\, L_x\,,$$

che possiamo riassumere concisamente nella

$$[L_\mu, L_\nu] = i\hbar\, \epsilon_{\mu\nu\rho} L_\rho\,, \tag{8.4}$$

o, equivalentemente,

$$[\mathbf{a}\cdot\mathbf{L}, \mathbf{b}\cdot\mathbf{L}] = i\hbar\,(\mathbf{a}\wedge\mathbf{b})\cdot\mathbf{L}\,,$$

dove $\mathbf{a}$ e $\mathbf{b}$ sono arbitrari vettori "c-numero"[1]. D'altra parte, è facile verificare che il modulo quadro di $\mathbf{L}$, vale a dire

$$L^2 = \mathbf{L}\cdot\mathbf{L} = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2\,,$$

[1] Con c-numero si intende un *numero classico*, cioè un multiplo dell'operatore identità. Al contrario un "q-numero" è un operatore non banale sullo spazio di Hilbert.

commuta con ciascuna componente

$$[L^2, L_x] = [L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0 ,$$

ovvero, più in breve

$$[L^2, \mathbf{L}] = 0 .$$

Di conseguenza L^2 ed una delle tra componenti, diciamo L_z (questa è la scelta standard, ma una qualsiasi combinazione lineare di L_x, L_y e L_z andrebbe altrettanto bene), possono essere diagonalizzati simultaneamente.

Osservazione *[]Conviene ora adottare le unità di misura in cui* $\hbar = 1$. *In altri termini, misuriamo i momenti lineari in unità di* $\hbar \times [\textit{lunghezze}]^{-1}$, *i momenti angolari in unità di* $\hbar$ *e le energie in unità di* $\hbar \times [\textit{tempi}]^{-1}$.

Altre regole di commutazione rilevanti sono quelle tra $\mathbf{L}$ e la coppia canonica $\mathbf{x}$, $\mathbf{p}$:

$$[L_\mu, x_\nu] = i\epsilon_{\mu\nu\rho} x_\rho , \quad [L_\mu, p_\nu] = i\epsilon_{\mu\nu\rho} p_\rho .$$

Esse implicano fra l'altro che $r^2 = \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}$ e $p^2 = \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}$ commutano con $\mathbf{L}$. Quindi aggiungendo una funzione di p^2 e/o di r alla coppia L^2, L_z otteniamo un insieme completo di osservabili compatibili per il singolo punto materiale. Si pensi ad esempio alla Hamiltoniana corrispondente ad un campo centrale studiata nel cap. 6.5. Esplicitamente abbiamo, adottando la convenzione della somma sugli indici ripetuti,

$$\begin{aligned} L^2 &= \epsilon_{\mu\nu\rho}\epsilon_{\mu\lambda\sigma} x_\nu p_\rho x_\lambda p_\sigma \\ &= (\delta_{\nu\lambda}\delta_{\rho\sigma} - \delta_{\nu\sigma}\delta_{\rho\lambda}) x_\nu p_\rho x_\lambda p_\sigma \\ &= x_\mu p_\nu (x_\mu p_\nu - x_\nu p_\mu) \\ &= r^2 p^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p})^2 + i\mathbf{x} \cdot \mathbf{p} . \end{aligned}$$

Possiamo quindi porre, nella rappresentazione della posizione,

$$p^2 = p_r^2 + \frac{1}{r^2} L^2 , \tag{8.5}$$

dove, come si calcola agevolmente in coordinate sferiche, p_r^2 è il quadrato dell'operatore differenziale simmetrico

$$p_r = -i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$$

(vedi Eq. (4.7)).

PROBLEMA 8.1-1 []Sempre nella rappresentazione della posizione, in coordinate sferiche, si verifichi che $L_\pm \equiv L_x \pm iL_y$ e L_z diventano gli operatori

differenziali

$$
\begin{aligned}
L_\pm &= e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cot\vartheta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
L_z &= -i\frac{\partial}{\partial\varphi}\,.
\end{aligned}
\tag{8.6}
$$

Quindi abbiamo

$$
L^2 = -\frac{1}{\sin^2\vartheta}\left[\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \tag{8.7}
$$

L^2 e L_z contengono solo gli angoli sferici e non la coordinata radiale r. Al contrario p_r non coinvolge ϑ e φ ma solo r, per cui commuta con L^2 e L_z senza essere una funzione degli stessi. La relazione (8.5) realizza in definitiva la separazione del problema agli autovalori per la particella in un campo centrale.

PROBLEMA 8.1-2 []Si considerino le coordinate proiettive $(w, \bar{w})$ sulla sfera S^2, legate agli angoli sferici ϑ e φ dalla relazione $w = e^{i\varphi}\cot\vartheta$, $\bar{w}$ = coniugata complessa di w. Si verifichi che $L_\pm$ e L_z assumono la forma

$$
L_+ = -\bar{\partial} - w^2\partial\,,\ L_- = \partial + \bar{w}^2\bar{\partial}\,,\ L_z = w\partial - \bar{w}\bar{\partial}
$$

dove $\partial = \partial_w$ e $\bar{\partial} = \partial_{\bar{w}}$. Si verifichino inoltre le regole di commutazione (8.4), nonché la relazione $L_- = L_+^\dagger$ (N.B.: la misura per l'integrazione di Lebesgue su S^2 non è semplicemente $dw\,d\bar{w}$, come sarebbe sul piano $\mathbb{R}^2$.)

Come già sappiamo da §4.1.3 e §6.5.1, gli operatori differenziali L^2 e L_z sono diagonali sulle **armoniche sferiche** $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$,

$$
L^2 Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm}\,, \quad L_z Y_{lm} = m Y_{lm}\,,
$$

con $l = 0, 1, 2, \ldots$ e $m = l, -l+1, \ldots, l-1, l$. Questa particolare quantizzazione degli autovalori $l(l+1)$ e m è dovuta alle condizioni al contorno che sembra naturale imporre su $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ per via della natura angolare dei suoi argomenti. Esse sono: regolarità in $\vartheta = 0$ e $\vartheta = \pi$ e periodicità in φ, $Y_{lm}(\vartheta, \varphi + 2\pi) = Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$. Tuttavia queste due richieste sono veramente naturali per campi classici, come quello elettromagnetico e quelli che descrivono i mezzi materiali continui, che sono per ipotesi grandezze fisiche osservabili. Non è così per la funzione d'onda quantomeccanica ψ, la quale, al contrario del suo modulo quadro, non possiede una interpretazione fisica diretta. Ora $|\psi|^2$ può benissimo essere regolare in $\vartheta = 0$ e $\vartheta = \pi$ e periodica in φ (ovvero monodroma in $\mathbb{R}^3$), senza che la ψ stessa lo sia. Ad esempio le condizioni di periodicità a meno di un fattore di fase (o condizioni di *quasiperiodicità*), $\psi(r, \vartheta, \varphi + 2\pi) = e^{2i\pi\alpha}\psi(r, \vartheta, \varphi)$, garantiscono la periodicità di $|\psi|^2$, soddisfano alla naturale richiesta che

$-i\partial/\partial\varphi$ sia autoaggiunto e non sono in conflitto con la regolarità in $\vartheta = 0$ e $\vartheta = \pi$ dello stesso $|\psi|^2$. Ma con tali condizioni al contorno lo spettro di $-i\partial/\partial\varphi$ non coincide più con gli interi relativi.

PROBLEMA 8.1-3 []Si verifichi che se si ammettessero autofunzioni quasiperiodiche lo spettro di $-i\partial/\partial\varphi$ sarebbe della forma $\{n + \alpha \,|\, n \in \mathbb{Z}\}$ (si osservi che $e^{i\alpha\varphi}$ trasforma funzioni d'onda periodiche in funzioni d'onda quasiperiodiche ed agisce come una traslazione su $-i\partial/\partial\varphi$).

Tuttavia autofunzioni quasiperiodiche non sono ammissibili in quanto non possono essere simultaneamente autofunzioni di L^2: queste ultime sono infatti date da restrizioni alla superficie della sfera S^2 di funzioni che devono essere differenziabili in $\mathbb{R}^3$, dato che appartenengono al dominio dell'operatore di Laplace. Le autofunzioni Y_{lm} di L_z e L^2 sono dunque differenziabili sulla sfera S^2. Questa circostanza risulta meglio evidenziata dalla notazione $Y_{lm} = Y_{lm}(\hat{x})$, $\hat{x} = x/|x|$, che d'ora in poi adotteremo. Si osservi che S^2 è una varietà *semplicemente connessa*: ogni curva chiusa su S^2 è contraibile in modo continuo ad un singolo punto. Una funzione quasiperiodica in φ, così come ogni altra funzione polidroma lungo una curva chiusa, deve necessariamente avere delle singolarità tali da porla al di fuori del dominio di definizione simultaneo di L_z e L^2. L'analisi in coordinate "singolari" come quelle sferiche risulta quindi più intricata del dovuto.

In effetti, per verificare che L_z può avere solo autovalori interi, possiamo procedere in modo puramente algebrico, senza far ricorso ad una rappresentazione specifica. Introduciamo gli operatori

$$a_1 = \tfrac{1}{2}[x + p_y - i(y - p_x)]$$
$$a_2 = \tfrac{1}{2}[x - p_y + i(y + p_x)]$$

e i relativi coniugati hermitiani $a_1^\dagger$ e $a_2^\dagger$. Essi soddisfano alle usuali regole di commutazione di creazione-annichilazione (vedi al §6.2),

$$[a_j\,, a_k] = 0 = [a_j^\dagger\,, a_k^\dagger]$$
$$[a_j\,, a_k^\dagger] = \delta_{jk}\,,$$

dove $j, k = 1, 2$. Si verifica quindi facilmente che

$$L_z = a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2\,,$$

ovvero che L_z si può scrivere come differenza di due operatori-numero indipendenti (vedi ancora al §6.2 sull'oscillatore armonico). Se ne deduce subito che lo spettro di L_z ha la forma $m = n_1 - n_2$, con n_1 e n_2 interi non negativi. Quindi m può assumere tutti e soli i valori interi, con degenerazione contabilmente infinita.

8.2. Rotazioni e momento angolare

Lo spazio di Hilbert di un punto materiale sostiene in modo del tutto naturale una rappresentazione del gruppo delle rotazioni (per la nozione generale di gruppo e di rappresentazione vedi App. B.1). Questa affermazione si spiega nel modo seguente.

Una **rotazione** R è una trasformazione $\mathbf{x} \to \mathbf{x}'$ dello spazio fisico $\mathbb{R}^3$ in se stesso che

a) lascia invariate le distanze tra ogni coppia di punti;
b) non sposta l'origine delle coordinate cartesiane;
c) preserva l'orientazione relativa degli assi.

La proprietà a) implica *a fortiori* che (continua a valere la convenzione *indici ripetuti = indici sommati*)

$$dx'_\mu\, dx'_\mu = \frac{\partial x'_\mu}{\partial x_\lambda}\frac{\partial x'_\mu}{\partial x_\nu}\, dx_\lambda\, dx_\nu = dx_\mu\, dx_\mu\ ,$$

ovvero che $R_{\mu\nu} \equiv \partial x'_\mu/\partial x_\nu$ sono gli elementi di una matrice ortogonale R: $RR^T = 1$. Nel caso di una trasformazione infinitesima (possibile in quanto l'orientazione relativa degli assi viene conservata), possiamo quindi scrivere

$$x'_\mu \simeq x_\mu + \xi_\mu\ , \quad R_{\mu\nu} \simeq \delta_{\mu\nu} + \partial_\nu \xi_\mu\ ,$$

dove ξ_μ è una funzione infinitesima di $\mathbf{x}$ e ∂_μ è una abbreviazione di $\partial/\partial x_\mu$. La condizione di ortogonalità diventa quindi

$$\begin{aligned}\delta_{\mu\nu} = R_{\lambda\mu}R_{\lambda\nu} &\simeq (\delta_{\lambda\mu} + \partial_\lambda\xi_\mu)(\delta_{\lambda\nu} + \partial_\lambda\xi_\nu)\\ &= \delta_{\mu\nu} + \partial_\mu\xi_\nu + \partial_\nu\xi_\mu + O(\xi^2)\ ,\end{aligned}$$

cioè $\partial_\mu\xi_\nu = -\partial_\nu\xi_\mu$. Ma allora

$$\begin{aligned}\partial_\lambda\partial_\mu\xi_\nu &= -\partial_\lambda\partial_\nu\xi_\mu = -\partial_\nu\partial_\lambda\xi_\mu\\ &= +\partial_\nu\partial_\mu\xi_\lambda = +\partial_\mu\partial_\nu\xi_\lambda\\ &= -\partial_\mu\partial_\lambda\xi_\nu = -\partial_\lambda\partial_\mu\xi_\nu\ ,\end{aligned}$$

cioè $\partial_\lambda\partial_\mu\xi_\nu = 0$, per cui $\partial_\mu\xi_\nu$ e quindi $R_{\mu\nu}$ sono delle costanti. In definitiva abbiamo dimostrato che le rotazioni hanno la forma analitica

$$\mathbf{x} \longrightarrow R\mathbf{x}\ , \quad (R\mathbf{x})_\mu = R_{\mu\nu}x_\nu$$

con R matrice ortogonale che preserva l'orientazione relativa degli assi, vale a dire $\det R = 1$. Dato che la composizione di due rotazioni si traduce nella moltiplicazione delle due matrici corrispondenti, si deduce infine che il gruppo delle rotazioni è isomorfo a $SO(3)$, il gruppo delle matrici ortogonali con determinante unitario.

Ogni trasformazione di $\mathbb{R}^3$ induce una trasformazione sulle funzioni definite su $\mathbb{R}^3$. In particolare, il modulo quadro della funzione d'onda ψ

del punto materiale, che come sappiamo rappresenta la densità di probabilità di trovare la particella, è una grandezza *scalare*, nel senso che assume nel punto trasformato lo stesso valore che aveva nel punto originale:

$$\mathbf{x} \to \mathbf{x}' \Longrightarrow \psi \to \psi' \,, \quad |\psi'(\mathbf{x}')|^2 = |\psi(\mathbf{x})|^2 \,.$$

Questa proprietà risulta ovvia quando la trasformazione in questione viene considerata nel senso *passivo*, cioè come un cambiamento di coordinate che lascia i punti di $\mathbb{R}^3$ immobili ma ne cambia la parametrizzazione. (Viceversa, nella visione *attiva* il sistema di riferimento resta fisso mentre i punti di $\mathbb{R}^3$ ruotano attorno ad un determinato asse). Ora, per definizione, un punto materiale non ha alcuna struttura interna e risulta interamente caratterizzato dall'insieme completo di osservabili compatibili costituito dalle tre componenti della posizione. Nel caso delle rotazioni otteniamo perciò

$$|\psi'(R\mathbf{x})|^2 = |\psi(\mathbf{x})|^2 \,.$$

Tuttavia questa relazione non è sufficiente per definire la nuova funzione d'onda ψ', dato che non ne fissa la fase. In linea di principio potremmo porre

$$\psi'(R\mathbf{x}) = e^{i\zeta(\mathbf{x},R,\psi)}\psi(\mathbf{x}) \,, \tag{8.8}$$

dove la grandezza reale ζ potrebbe dipendere dal punto, dalla rotazione e dalla particolare funzione d'onda. Dobbiamo però tenere conto che, oltre alla densità di probabilità, la funzione d'onda definisce anche la corrente di probabilità $\mathbf{j} = \mathfrak{Im}\,[\bar{\psi}\nabla\psi]$ (si veda il §5.2.6 e si ricordi che $\hbar = 1$ nelle unità attuali). Risulta naturale richiedere che $\mathbf{j}$ si trasformi come un *vettore* sotto rotazioni, cioè come $\mathbf{x}$:

$$j'_\mu(\mathbf{x}') = R_{\mu\nu} j_\mu(\mathbf{x}) \,, \tag{8.9}$$

dove evidentemente $\mathbf{j}'$ è la corrente definita da ψ'. Se ψ si trasformasse con il fattore di fase come nella (8.8), allora

$$\begin{aligned} j'_\mu(\mathbf{x}') &= \frac{1}{m}\mathfrak{Im}\left[\bar{\psi}'(\mathbf{x}')\partial'_\mu\psi(\mathbf{x}')\right] \\ &= \frac{1}{m}\,\mathfrak{Im}\left[e^{-i\zeta}\bar{\psi}(\mathbf{x})\,R_{\mu\nu}\partial_\nu\left\{e^{-i\zeta}\psi(\mathbf{x})\right\}\right] \\ &= R_{\mu\nu}\,j_\nu(\mathbf{x}) + \frac{1}{m}\,R_{\mu\nu}\mathfrak{Re}\left[\,|\psi(\mathbf{x})|^2\,\partial_\nu\zeta\,\right] \,. \end{aligned}$$

L'accordo con la richiesta (8.9) impone quindi che ζ non dipenda dal punto: $\partial_\mu\zeta = 0$. In sostanza, dato che stiamo lavorando nella rappresentazione della posizione in cui $p_\mu = -i\partial_\mu$, la condizione appena trovata ci permette di applicare la regola della derivata composta per calcolare la

legge di trasformazione del momento, che risulta essere quella propria dei vettori

$$\partial_\mu = \frac{\partial x'_\nu}{\partial x_\mu}\,\partial'_\nu \Longrightarrow p'_\mu = R_{\mu\nu} p_\nu \ . \tag{8.10}$$

Tuttavia ζ potrebbe ancora dipendere sia da R che da ψ. Non è questa la sede per discutere oltre tali possibilità, per cui rimandiamo la questione al prossimo capitolo, che è dedicato alla trattazione generale delle simmetrie in meccanica quantistica. Grazie al *teorema di Wigner* (vedi al §9.1.1) sulla realizzazione delle *trasformazioni di simmetria* in meccanica quantistica, si dimostra allora che risulta sempre possibile ridefinire le fasi globali delle funzioni d'onda in modo tale che $\zeta(R,\psi) = 0$ per qualunque rotazione R e funzione d'onda ψ. Il fatto che le funzioni d'onda si trasformino secondo una legge universale, uguale per tutte, garantisce che le rotazioni agiscono linearmente sullo spazio di Hilbert,

$$c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \longrightarrow c_1\psi'_1 + c_2\psi'_2$$

e conservano i prodotti scalari

$$\begin{aligned}\langle\psi'|\phi'\rangle &= \int d^3x'\,\overline{\psi'(\mathbf{x}')}\phi'(\mathbf{x}') \\ &= \int d^3x\,\overline{\psi(\mathbf{x})}\phi(\mathbf{x}) \\ &= \langle\psi|\phi\rangle \ .\end{aligned}$$

Si tratta cioè di trasformazioni unitarie. In definitiva, siamo arrivati al seguente fondamentale risultato: ad ogni rotazione R corrisponde la trasformazione $\psi \to \psi' \equiv U(R)\psi$, dove l'azione dell'operatore unitario $U(R)$ risulta definita dalla (8.8) con $\zeta = 0$, vale a dire

$$(U(R)\psi)(\mathbf{x}) = \psi(R^{-1}\mathbf{x}) \ . \tag{8.11}$$

Questa corrispondenza $R \to U(R)$ costituisce la **rappresentazione scalare** del gruppo $SO(3)$ delle rotazioni.

Per verificare che la (8.11) definisce effettivamente una rappresentazione di $SO(3)$ ci basta comporre due trasformazioni:

$$\begin{aligned}(U(R_1)U(R_2)\psi)(\mathbf{x}) &= (U(R_2)\psi)(R_1^{-1}\mathbf{x}) \\ &= \psi(R_2^{-1}R_1^{-1}\mathbf{x}) \\ &= \psi((R_1R_2)^{-1}\mathbf{x}) \\ &= (U(R_1R_2)\psi)(\mathbf{x}) \ ,\end{aligned}$$

ovvero, dato che ψ è arbitraria,

$$U(R_1)\,U(R_2) = U(R_1R_2) \ ,$$

che è quanto richiesto. La denominazione *scalare* specifica che si tratta di quella naturalmente sostenuta da oggetti scalari. In effetti, avremmo potuto fin dall'inizio assumere la legge di trasformazione (8.11) per le funzioni d'onda del punto materiale, semplicemente richiedendo che la ψ stessa, e non solo il suo modulo quadro, sia una funzione scalare sotto rotazioni. Un modo molto rapido di procedere consiste nel fare uso dei vettori generalizzati $|\mathbf{x}\rangle$ che descrivono gli stati di localizzazione idealmente esatta. Risulta allora naturale definire $U(R)$ tramite l'azione su di essi

$$U(R)\,|\mathbf{x}\rangle = |R\,\mathbf{x}\rangle \ . \tag{8.12}$$

Un fattore di fase davanti al membro di sinistra, in linea di principio sempre possibile, non potrebbe comunque dipendere da $\mathbf{x}$, in base alla richiesta che l'operatore momento $\mathbf{p}$ si trasformi come un vettore (vedi Eq. (8.10)). Potrebbe quindi dipendere solo da R ed essere perciò eliminabile da una ridefinizione di $U(R)$. Otteniamo così

$$(U(R)\psi)(\mathbf{x}) \equiv \langle\mathbf{x}|\,U(R)\,|\psi\rangle = \left\langle R^{-1}\,\mathbf{x}\middle|\psi\right\rangle = \psi(R^{-1}\,\mathbf{x})$$

che è proprio la regola (8.11). In apparenza abbiamo evitato tutto il discorso precedente sulla universalità della legge di trasformazione. Di fatto non è così: la definizione (8.12) di per sé non basta per affermare che $U(R)$ è un operatore lineare sullo spazio di Hilbert, dobbiamo richiederlo esplicitamente

$$U(R)\,|\psi\rangle \equiv \int d^3x\,\psi(\mathbf{x})\,U(R)\,|\mathbf{x}\rangle \ .$$

Questa procedura è senza dubbio consistente, il problema è l'unicità, a meno di fattori di fase banali, del risultato (8.11). Il teorema di Wigner, assieme a certe proprietà delle rotazioni che discuteremo al §9.3.4, ci assicura proprio che qualunque altra realizzazione delle rotazioni sui raggi dello spazio di Hilbert (si ricordi che solo i raggi hanno un significato fisico diretto) è equivalente alla (8.11).

Esaminiamo ora la connessione tra rotazioni e momento angolare orbitale. Una **rotazione infinitesima** per definizione differisce poco dalla trasformazione identica, ovvero si scrive

$$R \simeq 1 + \delta\alpha\,\mathcal{M} \tag{8.13}$$

dove $\delta\alpha$ è un parametro infinitesimo e $\mathcal{M}$ è una matrice antisimmetrica, $\mathcal{M}^T = -\mathcal{M}$. Gli elementi di tale matrice sono quindi della forma $\mathcal{M}_{\mu\nu} = \epsilon_{\mu\nu\sigma}\lambda_\sigma$, con λ_μ le componenti del trivettore $\boldsymbol{\lambda}$. Allora, al primo ordine

in $\delta\alpha$, di ottiene

$$\begin{aligned}(U(R)\psi)(\mathbf{x}) &\simeq \psi(\mathbf{x}+\delta\alpha\,\mathcal{M}\mathbf{x})\\ &\simeq \psi(\mathbf{x})+\delta\alpha\,\mathcal{M}_{\mu\nu}x_\nu\partial_\mu\psi(\mathbf{x})\\ &= [\mathbb{1}-i\delta\alpha\,\lambda_\mu L_\mu]\psi(\mathbf{x})\,,\end{aligned}$$

dove $L_\mu = -i\,\epsilon_{\mu\nu\sigma}x_\nu\partial_\sigma$ sono proprio le componenti cartesiane del momento angolare orbitale. Quindi, data l'arbitrarietà di ψ , deve valere

$$U(R) \simeq \mathbb{1} - i\delta\alpha\,\boldsymbol{\lambda}\cdot\mathbf{L}\,. \tag{8.14}$$

Si noti che anche R in (8.13) si può riscrivere in una forma analoga,

$$R \simeq 1 - i\delta\alpha\,\boldsymbol{\lambda}\cdot\boldsymbol{\ell}\,,$$

in termini della terna $\boldsymbol{\ell}$ di matrici hermitiane con elementi

$$(\ell_\mu)_{\nu\sigma} = -i\epsilon_{\mu\nu\sigma}\,. \tag{8.15}$$

È facile calcolare le regole di commutazione

$$[\ell_\mu\,,\ell_\nu] = i\epsilon_{\mu\nu\rho}\ell_\rho\,, \tag{8.16}$$

che sono strutturalmente identiche a quelle soddisfatte da $\mathbf{L}$, Eq. (8.4). Componendo infinite volte la stessa rotazione infinitesima si ottiene una rotazione finita (possiamo identificare $\delta\alpha$ con N^{-1} nel limite $N\to\infty$):

$$R(\boldsymbol{\lambda}) \equiv \lim_{N\to\infty}\left[1 - i\frac{\boldsymbol{\lambda}\cdot\boldsymbol{\ell}}{N}\right]^N = \exp(-i\boldsymbol{\lambda}\cdot\boldsymbol{\ell})\,.$$

Per stabilire in modo geometricamente chiaro quale sia la rotazione effettivamente descritta da $R(\boldsymbol{\lambda})$, introduciamo il versore $\mathbf{n} = \boldsymbol{\lambda}/|\boldsymbol{\lambda}|$ e l'angolo $\alpha = |\boldsymbol{\lambda}|$. Si trova allora (il calcolo è lasciato come esercizio):

$$R(\boldsymbol{\lambda})\,\mathbf{x} = \mathbf{x}\cos\alpha + \mathbf{n}\wedge\mathbf{x}\sin\alpha + (1-\cos\alpha)(\mathbf{n}\cdot\mathbf{x})\,\mathbf{n}\,. \tag{8.17}$$

Si tratta quindi di una rotazione antioraria di un angolo (per definizione positivo) α attorno all'asse individuato dal versore $\mathbf{n}$ (rotazioni con angoli negativi sono riprodotte come rotazioni antiorarie attorno all'asse $-\mathbf{n}$). L'espressione

$$R(\boldsymbol{\lambda}) \equiv R(\mathbf{n},\alpha) = \exp(-i\alpha\,\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\ell}) \tag{8.18}$$

definisce $\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\ell}$ come il *generatore* delle rotazioni attorno all'asse $\mathbf{n}$. Possiamo ora ripetere la stessa analisi per l'operatore $U(\mathbf{n},\alpha) \equiv U(R(\boldsymbol{\lambda}))$ che rappresenta $R(\boldsymbol{\lambda})$ sullo spazio di Hilbert[2]. Otteniamo

$$U(\mathbf{n},\alpha) = \exp(-i\alpha\,\mathbf{n}\cdot\mathbf{L}) \tag{8.19}$$

[2]Dato che lo spazio di Hilbert in questione è infinito-dimensionale, bisogna specificare il dominio su cui valgono veramente oggetti come $[\mathbb{1} - i\delta\alpha\,\boldsymbol{\lambda}\cdot\mathbf{L}/N]^N$ per N arbitrariamente grandi. Si dimostra comunque che tale dominio è denso nello spazio di Hilbert, per cui il limite $N\to\infty$ definisce un unico operatore unitario.

che identifica in $\mathbf{n}\cdot\mathbf{L}$, cioè nella componente del momento angolare orbitale lungo l'asse individuato da $\mathbf{n}$, il generatore delle trasformazioni unitarie sullo spazio di Hilbert di un punto materiale corrispondenti alle rotazioni attorno allo stesso asse. In breve, il vettore $\mathbf{L}$ genera le rotazioni di un punto materiale quantomeccanico.

Abbiamo dunque verificato che R e $U(R)$ hanno la stessa forma esponenziale, l'una in funzione delle matrici hermitiane $\boldsymbol{\ell}$ e l'altro degli operatori autoaggiunti $\mathbf{L}$. I generatori $\boldsymbol{\ell}$ ed i loro rappresentanti sullo spazio di Hilbert, $\mathbf{L}$, soddisfano alle stesse regole di commutazione, (8.16) e (8.4), rispettivamente. Per calcolare tali regole abbiamo fatto uso della forma esplicita di $\boldsymbol{\ell}$ (Eq. (8.15)) e di $\mathbf{L}$ (Eq. (8.3)), ma dovrebbe ormai essere chiaro che esse sono univocamente fissate dalla struttura gruppale di $SO(3)$ (vedi l'App. B.1). Per verificarlo esplicitamente, consideriamo il cosiddetto **commutatore finito**

$$C(R_1, R_2) = R_1 R_2 R_1^{-1} R_2^{-1}$$

dove $R_1 = R(\mathbf{n}_1, \alpha_1)$ e $R_2 = R(\mathbf{n}_2, \alpha_2)$. Sviluppando fino al secondo ordine i vari esponenziali si trova

$$C(R_1, R_2) \simeq 1 - \alpha_1\alpha_2[\mathbf{n}_1 \cdot \boldsymbol{\ell}, \mathbf{n}_2 \cdot \boldsymbol{\ell}] \,.$$

D'altro lato possiamo calcolare esplicitamente $C(R_1, R_2)$ dalla formula (8.17) e trovare, allo stesso ordine in $\alpha_1\alpha_2$:

$$C(R_1, R_2) \simeq 1 - i\alpha_1\alpha_2(\mathbf{n}_1 \wedge \mathbf{n}_2) \cdot \boldsymbol{\ell} \,.$$

Le regole di commutazione (8.16) seguono immediatamente. Dunque alla legge di composizione del gruppo $SO(3)$ corrisponde una precisa struttura algebrica nello spazio lineare dei generatori (le matrici hermitiane puramente immaginarie che si ottengono combinando linearmente le tre ℓ_μ) caratterizzata da determinate regole di commutazione che si chiudono sui generatori stessi. Si tratta di una cosiddetta **algebra di Lie**. Data una rappresentazione unitaria $R \to U(R)$ del gruppo $SO(3)$, si ottiene quindi automaticamente una rappresentazione autoaggiunta della sua algebra di Lie, poiché

$$C(U(R_1), U(R_2)) = U(C(R_1, R_2)) \,.$$

Come vedremo, il viceversa non è sempre vero.

8.2.1. Momento angolare interno. Consideriamo ora l'estensione della rappresentazione scalare (8.11) ad una collezione di punti materiali, caratterizzati dalle coppie canoniche $(\mathbf{x}_j, \mathbf{p}_j)$, $j = 1, 2, \ldots, N$. I singoli momenti angolari orbitali, $\mathbf{L}_j = \mathbf{x}_j \wedge \mathbf{p}_j$, soddisfano alle regole di commutazione

$$[\mathbf{a} \cdot \mathbf{L}_j, \mathbf{b} \cdot \mathbf{L}_k] = i\,\delta_{jk}\,(\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}) \cdot \mathbf{L}_j \,.$$

Dunque $\mathbf{L}_j$ genera gli operatori $U_j(R)$ che ruotano soltanto l'argomento $\mathbf{x}_j$ della funzione d'onda $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N)$:

$$(U_j(R)\psi)(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n) = \psi(\mathbf{x}_1, \ldots R^{-1}\mathbf{x}_j, \ldots, \mathbf{x}_n) \,.$$

Si tratta sempre di una rappresentazione unitaria delle rotazioni, ma certamente non di quella corrispondente alle rotazioni dello spazio fisico in cui si muovono le particelle. Queste ultime devono ammettere sia una interpretazione attiva che una passiva ed agire quindi simultaneamente su tutti gli argomenti della funzione d'onda, vale a dire

$$(U(R)\psi)(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n) = \psi(R^{-1}\mathbf{x}_1, R^{-1}\mathbf{x}_2, \ldots, R^{-1}\mathbf{x}_n) \,. \tag{8.20}$$

La rappresentazione $R \to U(R)$ è chiaramente fattorizzata nel prodotto diretto delle rappresentazioni sostenute da ciascuna particella:

$$U(R) = U_1(R)\, U_2(R) \ldots U_N(R)$$

ed è generata dal **momento angolare totale**

$$\mathbf{J} = \sum_{j=1}^{N} \mathbf{L}_j \,.$$

Possiamo anche ripetere le considerazioni fatte all'inizio del §8.1, e suddividere la collezione $\{\mathbf{L}_j \;\; j = 1, 2, \ldots N\}$ nel momento angolare orbitale $\mathbf{L}$ dell'intero sistema visto come un singolo oggetto, e nel momento angolare interno $\mathbf{M}$ (vedi Eq. (8.2)). Per costruzione $[\mathbf{L}, \mathbf{M}] = 0$, $\mathbf{L}$ genera le rotazioni del sistema come se tutte le particelle fossero concentrate nel centro di massa e $\mathbf{M}$ genera le rotazioni attorno al centro di massa. In ogni caso $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{M}$ e

$$U(R) = U_L(R) U_M(R) \,, \quad U_L(R) = e^{-i\boldsymbol{\lambda}\cdot\mathbf{L}} \,, \quad U_M(R) = e^{-i\boldsymbol{\lambda}\cdot\mathbf{M}} \,.$$

8.2.2. Momento angolare intrinseco: spin. Nel precedente paragrafo abbiamo considerato la classe più ovvia di rappresentazioni quantomeccaniche delle rotazioni, partendo dal singolo punto materiale ed estendendo la stessa logica a più particelle scalari, cioè punti materiali descritti da funzioni d'onda scalari sotto rotazioni. Ripensando però alla formulazione generale della meccanica quantistica, a lungo descritta nel cap. 7, risulta naturale prendere in considerazione possibilità più generali. Si tratta comunque di generalizzazioni imposte dall'evidenza sperimentale: esistono sistemi fisici assimilabili al punto materiale per i quali le componenti della posizione non formano tuttavia un insieme completo di osservabili compatibili. Vi sono cioè dei gradi di libertà "interni" e si pone il problema di stabilire se e come le rotazioni agiscano su di essi.

Osservazione *[]L'evidenza sperimentale a cui facciamo riferimento si ottiene agevolmente con un apparato di Stern-Gerlach (vedi al §5.1.6).*

Poiché il momento angolare interno $\mathbf{M}$ *di un atomo, inteso come momento angolare orbitale relativo al suo centro di massa, è quantizzato per multipli interi di* $\hbar$*, la sua proiezione lungo un asse arbitrario possiede comunque un numero dispari di autovalori. Di conseguenza un fascio di atomi dotati di momento magnetico dovrebbe essere sempre suddiviso in un numero dispari di sottofasci da un apparato di Stern-Gerlach. Si trovano invece specie atomiche che danno luogo ad un numero pari di suddivisioni, segnalando stati di momento angolare semintero. Dobbiamo quindi riconoscere l'esistenza di gradi di libertà "interni", sensibili alle rotazioni, in almeno una delle particelle che costituiscono gli atomi.*

Supponiamo che questi gradi di libertà interni siano discreti, cioè che esistano una o più osservabili, con spettro formato da un insieme finito di valori, che insieme alla posizione costituiscano un insieme completo di osservabili compatibili. Come sappiamo, lo spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ di un tale sistema è isomorfo al prodotto diretto $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)\otimes\mathcal{V}$, con $\mathcal{V}$ uno spazio lineare n-dimensionale. In altre parole la funzione d'onda ψ è un vettore colonna di n funzioni di $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)$. Se ciascuna di queste componenti fosse un oggetto scalare, $\psi'_j(\mathbf{x}') = \psi_j(\mathbf{x})$, $j = 1, 2, \ldots, n$, allora ψ si trasformerebbe sotto rotazioni secondo la legge scalare (8.11). Per la precisione, la rappresentazione $R \to U(R)$ si ridurrebbe semplicemente alla somma diretta di n copie della rappresentazione scalare. In questo caso i gradi di libertà interni sarebbero invarianti sotto rotazione e non ci sarebbe alcuna novità rispetto alla trattazione del paragrafo precedente. Per il momento raccogliamo genericamente sotto il termine di **isospin** tutti gli eventuali gradi di libertà interni invarianti sotto rotazione, rimandando al cap. 9 per ulteriori precisazioni.

Il caso più interessante si ha quando il vettore colonna ψ subisce una trasformazione lineare sotto la rotazione R, vale a dire

$$\psi'(\mathbf{x}') = D(R)\psi(\mathbf{x}) \,, \quad \mathbf{x}' = R\mathbf{x} \,, \tag{8.21}$$

dove $D(R)$ è una matrice $n \times n$. Esplicitando le componenti

$$\psi'_j(\mathbf{x}') = \sum_{k=1}^{n} D_{jk}(R)\psi_k(\mathbf{x}) \,.$$

La richiesta che le rotazioni siano trasformazioni di simmetria implica che $D(R)$ sia una matrice unitaria (vedi al cap. 9 per un'analisi più dettagliata). In ogni caso, se $D(R)$ è unitaria, allora i prodotti scalari sono conservati dalla trasformazione (8.21). Ponendo ora $\psi' = U(R)\psi$, otteniamo la legge di trasformazione complessiva

$$(U(R)\psi)(\mathbf{x}) = D(R)\,\psi(R^{-1}\mathbf{x}) \,, \tag{8.22}$$

Dalla composizione di due rotazioni,

$$\begin{aligned}(U(R_1)U(R_2)\psi)(\boldsymbol{x}) &= D(R_1)\,(U(R_2)\psi)(R_1^{-1}\boldsymbol{x})\\ &= D(R_1)D(R_2)\,\psi(R_2^{-1}R_1^{-1}\boldsymbol{x})\\ &= D(R_1)D(R_2)\,\psi((R_1R_2)^{-1}\boldsymbol{x})\end{aligned}$$

otteniamo $U(R_1R_2) = U(R_1R_2)$ purché $R \to D(R)$ sia essa stessa una rappresentazione

$$D(R_1)D(R_2) = D(R_1R_2)\,.$$

Tuttavia questa non è la possibilità più generale, dato che una **rappresentazione proiettiva**, , cioè una rappresentazione a meno di un fattore di fase

$$D(R_1)D(R_2) = \omega(R_1,R_2)D(R_1R_2)\,, \quad |\omega(R_1,R_2)| = 1\,, \tag{8.23}$$

non è in contrasto con alcun principio della meccanica quantistica, non essendo $\omega(R_1,R_2)$ direttamente misurabile. Nel caso del gruppo $SO(3)$ delle rotazioni si dimostra che $\omega(R_1,R_2) = \pm 1$ (vedi §8.2.4, §8.2.5 e §9.3.4).

Introduciamo ora i generatori S_x, S_y e S_z di $R \to D(R)$:

$$D(\boldsymbol{n},\alpha) \equiv D(R(\boldsymbol{n},\alpha)) = \exp(-i\alpha\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{S})\,.$$

Dalla legge di composizione (8.23) si ottengono le regole di commutazione

$$[S_\mu\,,S_\nu] = i\hbar\,\epsilon_{\mu\nu\rho}S_\rho\,.$$

Infatti, per continuità con il valore $\omega(1,1) = 1$, il fattore di fase $\omega(R_1,R_2)$ resta uguale a 1 per tutte le R_1 e R_2 vicine all'identità, per cui continua a valere l'eguaglianza tra

$$C(D(R_1),D(R_2)) \simeq 1 - \alpha_1\alpha_2[\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{S}\,,\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{S}]$$

da un lato e

$$D(C(R_1,R_2)) \simeq 1 - i\alpha_1\alpha_2(\boldsymbol{n}_1\wedge\boldsymbol{n}_2)\cdot\boldsymbol{S}$$

dall'altro.

Per quanto riguarda la rappresentazione complessiva (8.22) abbiamo la legge di composizione

$$U(R_1)U(R_2) = \omega(R_1,R_2)U(R_1R_2)\,, \quad \omega(R_1,R_2)^2 = 1$$

e la forma esponenziale

$$U(\boldsymbol{n},\alpha) = \exp(-i\alpha\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J})\,.$$

dove

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$$

è evidentemente il momento angolare totale del sistema. Per contro, il momento angolare $\boldsymbol{S}$ viene denoninato **momento angolare intrinseco** o **spin** del sistema (è preferibile riservare la denominazione "momento

angolare interno" al momento angolare orbitale attorno al proprio centro di massa di un sistema composto). Qualora la posizione $\mathbf{x}$ ed una delle tre componenti di $\mathbf{S}$ formino un insieme completo di osservabili compatibili, il sistema in questione fornisce un esempio di *particella dotata di spin*. Vedremo più avanti (§8.2.5 e §9.3.8) come caratterizzare formalmente tali sistemi in base a principi primi.

Per il momento si deve tenere ben presente che in meccanica quantistica lo spin $\mathbf{S}$ ed il momento angolare interno $\mathbf{M}$ sono concetti distinti. Innanzitutto M^2 ha uno spettro illimitato, mentre S^2 per ipotesi no. Inoltre, ogni componente di $\mathbf{M}$ ha autovalori interi, mentre, come vedremo in dettaglio più avanti, le componenti di $\mathbf{S}$ possono avere autovalori seminteri. Questo corrisponde al fatto che $\mathbf{M}$ genera comunque una rappresentazione di tipo scalare, con fattori di fase $\omega(R_1, R_2)$ identicamente uguali a 1, mentre $\mathbf{S}$ può generare anche rappresentazioni proiettivamente non banali. Lo spin è una novità propria della meccanica quantistica.

8.2.3. Momento angolare totale. Dagli esempi riportati nei precedenti paragrafi, si deduce la seguente generalizzazione: ogni sistema fisico $\mathcal{S}$ è necessariamente immerso nello spazio fisico $\mathbb{R}^3$, per cui, in modo più o meno significativo, le rotazioni agiscono su di esso come trasformazioni di simmetria (vedi il prossimo capitolo per la trattazione generale). Allora su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ risulta definita (teorema di Wigner) una rappresentazione unitaria di $SO(3)$, $R \to U(R)$. Gli operatori $U(R)$ soddifano alla stessa legge di composizione delle matrici di $SO(3)$, al più modificata dal fattore di fase $\omega(R_1, R_2) = \pm 1$:

$$U(R_1)\, U(R_2) = \omega(R_1, R_2) U(R_1 R_2).$$

Questo è sufficiente per introdurre la terna di generatori $\mathbf{J} = (J_1, J_2, J_3) = (J_x, J_y, J_z)$ tramite la formula generale

$$R(\boldsymbol{\lambda}) = \exp(-i\boldsymbol{\lambda} \cdot \boldsymbol{\ell}) \Longrightarrow U(R(\boldsymbol{\lambda})) = \exp(-i\boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{J}) \,,$$

dove i parametri $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ sono un set di **coordinate normali** (vedi il §8.2.8 e l'App. B.1) di $SO(3)$. Si dimostra (teorema di Stone) che i J_μ sono operatori autoaggiunti. L'osservabile **momento angolare totale** del sistema $\mathcal{S}$ viene per definizione identificata con il generatore $\mathbf{J}$ delle rotazioni. Quindi $\mathbf{J}$ deve ubbidire alle regole di commutazione proprie dell'algebra di Lie di $SO(3)$, vale a dire

$$[J_\mu \,, J_\nu] = i\epsilon_{\mu\nu\rho} J_\rho \,. \tag{8.24}$$

Esse sono equivalenti all'affermazione che $\mathbf{J}$ genera una rappresentazione delle rotazioni. L'ulteriore specifica di momento angolare *totale* va riservata al generatore della rappresentazione $U(R)$, che per ipotesi tiene

conto di tutti i gradi di libertà di $\mathcal{S}$ sensibili alle rotazioni dello spazio fisico $\mathbb{R}^3$.

8.2.4. Rotazioni e gruppo SU(2). La legge di composizione delle rotazioni fissa univocamente la struttura dell'algebra di Lie dei generatori di una qualunque rappresentazione, ma il viceversa non è vero, dato che la struttura dell'algebra di Lie rispecchia solo le proprietà locali e non quelle globali del gruppo. Due gruppi di Lie omomorfi ma distinti hanno la stessa algebra. Queste considerazioni si applicano proprio al caso di $SO(3)$, che non è *semplicemente connesso*. Esiste perciò un altro gruppo, indicato con $\overline{SO(3)}$ e denominato **ricoprimento universale** di $SO(3)$, che per l'appunto è omomorfo a $SO(3)$ e, essendo per definizione semplicemente connesso, non coincidere con esso. La parametrizzazione sopra introdotta in termini dell'angolo $\alpha = |\boldsymbol{\lambda}|$ e del versore $\mathbf{n} = \boldsymbol{\lambda}/|\boldsymbol{\lambda}|$ è particolarmente adatta per spiegare queste affermazioni.

Dato che una rotazione attorno a $\mathbf{n}$ con angolo $\alpha \geq \pi$ coincide con la rotazione di angolo $2\pi - \alpha \leq \pi$ attorno a $-\mathbf{n}$, lo spazio dei parametri (la cosiddetta varietà del gruppo) coincide con la sfera piena $|\boldsymbol{\lambda}| \leq \pi$ nella quale i punti antipodali sulla superficie sono identificati. Su tale varietà vi sono due classi di *omotopia* di curve chiuse: la classe banale, formata dalle curve contraibili in modo continuo ad un solo punto; e la classe delle curve non contraibili che si chiudono solo grazie all'identificazione antipodale. Il ricoprimento universale $\overline{SO(3)}$ è definito come il più piccolo gruppo semplicemente connesso che è omomorfo a $SO(3)$. Dato che le classi di omotopia sulla varietà di $SO(3)$ sono solo due, si tratta di un omomorfismo due ad uno: in $\overline{SO(3)}$ vi sono due elementi distinti che corrispondono alla medesima rotazione. In particolare, l'identificazione delle rotazioni di un angolo $\alpha = \pi$ attorno a $\mathbf{n}$ e $-\mathbf{n}$ viene rimossa. Questo equivale ad affermare che in $\overline{SO(3)}$ le rotazioni di un angolo $\alpha = 2\pi$ non coincidono con l'identità. Dato che componendo due curve omotopicamente non banali se ne ottiene una banale, si conclude che una rotazione con angolo $\alpha = 4\pi$ coincide con l'identità anche in $\overline{SO(3)}$. La varietà di $\overline{SO(3)}$ consiste perciò in due sfere piene di raggio π le cui superfici vanno identificate. Si tratta evidentemente di una varietà omeomorfa alla sfera tridimensionale S^3.

Si può inoltre mostrare che $\overline{SO(3)}$, il ricoprimento universale di $SO(3)$, è isomorfo al gruppo $SU(2)$ delle matrici 2×2 unitarie e unimodulari. Per verificarlo, sfruttiamo il fatto che l'algebra di Lie di $SU(2)$ è formata da tutte le matrici 2×2 hermitiane e scriviamo quindi un generico elemento $u \in SU(2)$ nella forma

$$u = \exp(-i\boldsymbol{\lambda} \cdot \boldsymbol{\sigma}/2) ,$$

dove $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ sono le tre matrici di Pauli (vedi l'App. B.1.4). Le matrici $\boldsymbol{\sigma}/2$ soddisfano alle regole di commutazione del momento angolare, grazie all'algebra soddisfatta dalle matrici di Pauli

$$\sigma_\mu \sigma_\nu = \delta_{\mu\nu} - i\epsilon_{\mu\nu\lambda}\sigma_\lambda \tag{8.25}$$

e costituiscono quindi una rappresentazione 2×2 delle (8.24). Ora, tramite le relazioni (8.25), possiamo calcolare ($\alpha = |\boldsymbol{\lambda}|$ e $\mathbf{n} = \boldsymbol{\lambda}/|\boldsymbol{\lambda}|$ come sopra)

$$u = \cos(\tfrac{1}{2}\alpha) - i\sin(\tfrac{1}{2}\alpha)\,\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

e analogamente

$$\begin{aligned} u^\dagger \sigma_\mu u &= \sigma_\mu \cos\alpha + (\mathbf{n}\wedge\mathbf{s})_\mu \sin\alpha + n_\mu(\mathbf{n}\cdot\mathbf{x})(1-\cos\alpha) \\ &= R_{\mu\nu}(\alpha,\mathbf{n})\,\sigma_\nu\,, \end{aligned} \tag{8.26}$$

il che dimostra che $SU(2)$ è una **rappresentazione a due valori** di $SO(3)$, con u e $-u$ che generano la stessa rotazione sul vettore $\boldsymbol{\sigma}$ (si veda anche l'App. B.1.4, per ulteriori dettagli). Viceversa, la seconda delle relazioni (8.26) afferma anche che $SO(3)$ è la **rappresentazione aggiunta** di $SU(2)$, cioè il gruppo delle trasformazioni lineari indotte dall'azione aggiunta $X \to u^{-1}Xu$ di $SU(2)$ sulla propria algebra di Lie. Si noti che una rappresentazione a due valori come la $R \to u(R)$ soddisfa alla legge di composizione delle rotazioni solo a meno di un fattore ± 1

$$u(R_1)u(R_2) = \pm u(R_1R_2)$$

In effetti, avendo individuato in $SU(2)$ il gruppo di ricoprimento universale di $SO(3)$, sarebbe più appropriato parlare di rappresentazioni di $SU(2)$, annoverarando tra queste la rappresentazione aggiunta $SO(3)$, piuttosto che il viceversa.

Per assicurarci che $SU(2)$ sia effettivamente $\overline{SO(3)}$ dobbiamo però verificare che $SU(2)$ sia semplicemente connesso: dato che ogni matrice di $SU(2)$ si scrive in modo unico nella forma

$$\begin{aligned} u &= u_0 + i\mathbf{u}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\bar\beta & \bar\alpha \end{pmatrix} \\ \alpha &= u_0 - iu_3\,, \quad \beta = u_2 + iu_1\,, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1\,, \end{aligned}$$

la varietà di $SU(2)$ è omeomorfa a S^3 che è effettivamente una varietà semplicemente connessa.

8.2.5. Rappresentazioni irriducibili. La rappresentazione $R \to U(R)$ sul generico spazio di Hilbert $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ è generalmente riducibile. Questo significa che esiste un sottospazio $\mathcal{V}$ di $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ che è invariante sotto rotazioni, cioè sotto l'azione dell'insieme di operatori $\{U(R),\, R \in SO(3)\}$. Tale sottospazio sostiene perciò una rappresentazione non banale $R \to V(R)$

"più piccola" di quella originale. Inoltre, ogni rappresentazione unitaria riducibile è completamente riducibile, nel senso che anche il complemento ortogonale di $\mathcal{V}$, $\mathcal{V}_\perp$, è invariante e sostiene una rappresentazione autonoma delle rotazioni (vedi l'App. B.1). In altri termini, deve esistere una base in $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ nella quale la rappresentazione originale $R \to U(R)$ è **diagonale a blocchi**: $U(R) = V(R) \oplus V_\perp(R)$ per ogni $R \in SO(3)$.

A loro volta le due sottorappresentazioni $R \to V(R)$ e $R \to V_\perp(R)$ potrebbero essere ancora ridotte a somme dirette di rappresentazioni ancora più piccole. Il processo termina quando si arriva alle **componenti irriducibili** della rappresentazione originale $R \to U(R)$. Si tratta di un passo assai rilevante, poiché semplifica enormemente il problema della determinazione dello spettro del momento angolare stesso e delle osservabili che si trasformano in modo definito sotto rotazioni (vedi il §8.2.10). Risulta quindi di fondamentale importanza classificare tutte le **rappresentazioni unitarie irriducibili** delle rotazioni. In altri termini si tratta di determinare tutte le rappresentazioni irriducibili delle regole di commutazione (8.24) mediante terne (J_1, J_2, J_3) di operatori autoaggiunti.

Osserviamo ora che le regole di commutazione (8.24) implicano che $J^2 = \mathbf{J} \cdot \mathbf{J}$ commuta con $\mathbf{J}$ e quindi con ogni elemento dell'algebra di Lie. Di conseguenza J^2 è un operatore invariante sotto rotazioni e, per il lemma di Schur, deve ridursi ad un multiplo dell'identità in ciascuna rappresentazione irriducibile. Funzioni dei generatori di una generica algebra di Lie dotati di questa proprietà sono detti **operatori di Casimir**. Nel caso dell'algebra di Lie di $SO(3)$ si verifica facilmente che J^2 è l'unico operatore di Casimir, a meno di funzioni di J^2 stesso. Dunque gli autovalori di J^2 servono per classificare le rappresentazioni irriducibili. Inoltre, le regole di commutazione (8.24) sono tali per cui una qualunque combinazione lineare a coefficienti reali di J_x, J_y e J_z costituisce da sola un insieme completo di osservabili compatibili all'interno di ciascuna rappresentazione unitaria irriducibile. Noi adotteremo la scelta convenzionale, legata ad un dato sistema di riferimento in $\mathbb{R}^3$, di diagonalizzare J_z.

Il problema di determinare lo spettro simultaneo di J^2 e J_z viene risolto in modo puramente algebrico, facendo uso solo delle (8.24) e della proprietà $J_\mu^\dagger = J_\mu$. A tale scopo, riscriviamo le regole di commutazione nella forma equivalente

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm\,, \quad [J_+, J_-] = 2J_z \tag{8.27}$$

dove $J_\pm = J_x \pm iJ_y$. Quindi consideriamo un insieme ortonormale di autovettori simultanei di J^2 e J_z:

$$J^2\,|k, m\rangle = k\,|k, m\rangle$$
$$J_z\,|k, m\rangle = m\,|k, m\rangle$$

ed osserviamo che J_+ agisce come innalzatore dell'autovalore m di J_z:

$$J_z J_+ |k, m\rangle = J_+(J_z + 1)\,|k, m\rangle = (m+1)J_+\,|k, m\rangle \ . \tag{8.28}$$

Analogamente si verifica che J_+ agisce come abbassatore di J_z:

$$J_z J_- |k, m\rangle = J_+(J_z - 1)\,|k, m\rangle = (m-1)J_+\,|k, m\rangle \ . \tag{8.29}$$

Evidentemente J_z, J_+ e $J_- = J_+^\dagger$ giocano un ruolo equivalente agli operatori N, a e $a^\dagger$ introdotti nella diagonalizzazione dell'oscillatore armonico (vedi cap. 6.2.1). Rispetto a quel problema, però, nel caso attuale abbiamo una diversa regola di commutazione tra innalzatore (operatore di creazione) ed abbassatore (operatore di distruzione). Inoltre abbiamo per ipotesi a disposizione un'ulteriore relazione quadratica tra J_z, J_+ e J_-. Infatti vale l'identità

$$\begin{aligned} J^2 &= \tfrac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2 \\ &= J_-J_+ + J_z + J_z^2 \\ &= J_+J_- - J_z + J_z^2 \end{aligned} \tag{8.30}$$

per cui, in particolare,

$$k = \langle k, m|\, J^2\, |k, m\rangle = \tfrac{1}{2}\|J_-\,|k, m\rangle\,\|^2 + \tfrac{1}{2}\|J_+\,|k, m\rangle\,\|^2 + m^2 \ .$$

Quindi $k \geq m^2$ e devono esistere, per ogni fissato k, due autovalori $m_<$ e $m_>$ tali che $m_< \leq m \leq m_>$. Allora necessariamente

$$J_-\,|k, m_<\rangle = 0 \ , \quad J_+\,|k, m_>\rangle = 0 \tag{8.31}$$

altrimenti la diseguaglianza appena stabilita verrebbe subito violata. Dalla seconda e dalla terza forma della relazione quadratica (8.30) si ottiene ora

$$\begin{aligned} J^2\,|k, m_>\rangle &= m_>(m_> + 1)\,|k, m_>\rangle \\ J^2\,|k, m_<\rangle &= m_<(m_< - 1)\,|k, m_<\rangle \end{aligned}$$

vale a dire

$$k = m_>(m_> + 1) = m_<(m_< - 1)$$

cioè

$$m_> = -m_< \equiv j \ , \quad k = j(j+1)$$

con j un numero non negativo. Infine, per via delle relazioni di innalzamento ed abbassamento (8.28) e (8.29), deve necessariamente esistere un intero non negativo n tale che

$$J_+^n\,|k, -j\rangle \propto |k, j\rangle$$

ovvero

$$-j + n = j \Longrightarrow j = n/2 \ .$$

Abbiamo così ottenuto una rappresentazione di (J_x, J_y, J_z) in termini di matrici hermitiane $(2j+1)\times(2j+1)$ per ogni j fissato. Infatti dalle relazioni (8.28),(8.29) e (8.31) abbiamo che

$$\begin{aligned} J_\pm |j,m\rangle &\propto |j,m\pm 1\rangle \\ J_+|j,j\rangle = 0 &= J_-|j,-j\rangle \end{aligned} \tag{8.32}$$

dove abbiamo introdotto la nuova notazione $|j,m\rangle$, al posto di quella iniziale $|j(j+1),m\rangle$, per gli autovettori di J^2 e J_z. I fattori di proporzionalità in (8.32) vengono fissati, a meno di una fase, calcolando la norma di $J_\pm|j,m\rangle$ con l'aiuto delle relazioni quadratiche (8.30):

$$||J_\pm|j,m\rangle||^2 = \langle j,m|J_\mp J_\pm|j,m\rangle = j(j+1) - m(m\pm 1)\ .$$

La scelta convenzionale è quella più semplice che ci permette di scrivere

$$J_\pm|j,m\rangle = [j(j+1) - m(m\pm 1)]^{1/2}|j,m\pm 1\rangle\ . \tag{8.33}$$

Si noti che $j(j+1)-m(m\pm 1) = (j\mp m)(j\pm m+1)$ correttamente si annulla per $m=\pm j$. Gli elementi di matrice

$$\begin{aligned} \langle j,m'|J_\pm|j,m\rangle &= [j(j+1)-m(m\pm 1)]^{1/2}\delta_{m',m\pm 1} \equiv D^{(j)}_{mm'}(J_\pm) \\ \langle j,m'|J_z|j,m\rangle &= m\delta_{m'm} \equiv D^{(j)}_{mm'}(J_z) \end{aligned} \tag{8.34}$$

definiscono la rappresentazione $(2j+1)$-dimensionale sopracitata, detta di *peso* o *spin* j, che denotiamo genericamente con il simbolo $D^{(j)}$.

Risulta evidente che si tratta di una rappresentazione irriducibile, dato che lo spazio lineare $(2j+1)$-dimensionale $\mathcal{V}_j$ formato da tutte le combinazioni lineari dei vettori $\{|j,m\rangle;\, m=-j,-j+1,\ldots,j-1,j\}$ non contiene alcun sottospazio invariante sotto l'azione di $J_\pm$ e J_z. Viceversa, una rappresentazione della terna (J_x, J_y, J_z) in cui J^2 non assume un valore definito $j(j+1)$ è necessariamente riducibile, in quanto né J_z né $J_\pm$, commutando con J^2, possono interpolare stati con autovalori di J^2 diversi. In definitiva, valgono le seguenti affermazioni generali:

a) I possibili autovalori dell'operatore di Casimir J^2 sono i numeri razionali della forma $j(j+1)$, con j intero o semintero non negativo, ovvero $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \ldots$.

b) Per ogni j tale che $j(j+1)$ appartiene allo spettro di J^2, gli autovalori di J_z sono i $2j+1$ numeri $m=-j,-j+1,\ldots,j-1,j$.

c) Ogni rappresentazione irriducibile delle regole di commutazione (8.24) in termini di matrici hermitiane risulta univocamente caratterizzata dal numero j, intero o semintero non negativo, ed è equivalente alla rappresentazione $(2j+1)$-dimensionale definita dalle relazioni (8.34). Passando dalle matrici hermitiane $D^{(j)}(J_\mu)$ che rappresentano J_μ, $\mu = 1,2,3$, ai loro esponenziali, si ottiene la rappresentazione unitaria irriducibile di peso j di $SO(3)$ o, più precisamente, del suo ricoprimento universale

$SU(2)$. Denoteremo tale rappresentazione con lo stesso simbolo, vale a dire $u \to D^{(j)}(u)$, $u \in SU(2)$:

$$u = \exp(-i\alpha\, \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}/2)\,, \quad D^{(j)}(u) = \exp[-i\alpha\, \mathbf{n} \cdot D^{(j)}(\mathbf{J})]\,.$$

In particolare $D^{(0)}(u) = \mathbb{1}$ è la rappresentazione banale, mentre abbiamo

$$D^{(1/2)}(u) = u\,, \quad D^{(1)}(u) = W R(u) W^{\dagger}\,,$$

dove W è la matrice unitaria 3×3 che trasforma i generatori $\boldsymbol{\ell}$ di $SO(3)$ nella terna $D^{(1)}(\mathbf{J})$:

$$D^{(1)}_{mm'}(\mathbf{J}) = W_{m\mu}\boldsymbol{\ell}_{\mu\nu}\overline{W}_{m'\nu}\,.$$

PROBLEMA 8.2-4 []Si calcoli la forma esplicita delle matrici $D^{(1)}(\mathbf{J})$ e W.

Nel caso di una rotazione attorno all'asse z, cioè per $R = R(\boldsymbol{\lambda})$, $\boldsymbol{\lambda} = (0, 0, \alpha)$, avremo

$$u = \begin{pmatrix} e^{i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

per quanto riguarda $SU(2)$ e $SO(3)$, mentre, sfruttando il fatto che $D^{(j)}(J_z)$ è diagonale,

$$D^{(j)}_{mm'}(u) = e^{im\alpha}\,\delta_{mm'} \quad m,\, m' \text{ non sommati}\,.$$

Quindi, se $\alpha \to \alpha + 2\pi$,

$$u \to -u\,, \quad R \to R\,, \quad D^{(j)}(u) \to (-)^{2j}\, D^{(j)}(u)\,,$$

ovvero

$$D^{(j)}(-u) = (-)^{2j}\, D^{(j)}(u)\,.$$

Questa relazione vale in generale, per qualunque $u \in SU(2)$, dato che le rotazioni attorno ad un asse arbitrario $\mathbf{n}$ sono **trasformazioni coniugate** rispetto a quelle attorno all'asse z:

$$u(\alpha, \mathbf{n}) = v\, u(\alpha, \mathbf{e}_z)\, v^{-1}\,,$$

dove $v \in SU(2)$ corrisponde ad una rotazione che porta $\mathbf{e}_z$, il versore dell'asse z, nel generico versore $\mathbf{n}$; ad esempio $v = u(\mathbf{n} \wedge \mathbf{e}_z, \vartheta)$ se $\mathbf{n} = (\sin\vartheta\cos\varphi, \sin\vartheta\sin\varphi, \cos\vartheta)$.

Dunque se j è un intero $D^{(j)}$ costituisce una rappresentazione in senso stretto di $SO(3)$, mentre se j è un semintero $D^{(j)}$ è una rappresentazione in senso stretto di $SU(2)$ ed una *rappresentazione a due valori* di $SO(3)$. Con questa precisazione in mente, possiamo adottare la

notazione $R \to D^{(j)}(R)$ anche per j semintero. Come conseguenza, però, se per $u \to D^{(j)}(u)$ possiamo sempre scrivere

$$D^{(j)}(u_1)D^{(j)}(u_2) = D^{(j)}(u_1 u_2)\,,$$

per $R \to D^{(j)}(R)$ dovremo scrivere

$$D^{(j)}(R_1)D^{(j)}(R_2) = \omega(R_1, R_2)D^{(j)}(R_1 R_2)\,, \tag{8.35}$$

con $\omega(R_1, R_2) = (\pm 1)^{2j}$. La natura proiettiva, rispetto a $SO(3)$, delle rappresentazioni con spin semintero è interamente dovuta al fatto che $SO(3)$ non è semplicemente connesso. I fattori di fase $\omega(R_1, R_2)$ spariscono passando a $SU(2)$, per il quale si dimostra che tutte le rappresentazioni sono equivalenti a rappresentazioni strettamente vettoriali, cioè senza fattori di fase proiettivi (vedi §9.3.4).

Data la classificazione delle rappresentazioni irriducibili di $SO(3)$, in un sistema fisico concreto caratterizzato da uno spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ e da una rappresentazione $R \to U(R)$ definite a priori, si pone ora il fondamentale problema di determinare la decomposizione di $U(R)$ in rappresentazioni irriducibili. Si tratta cioè di individuare tutti gli *stati di peso massimo* $|j, m = j, \tau\rangle$ annichilati da J_+, con τ come collezione di tutti gli altri numeri quantici necessari per la completa identificazione dello stato. Fatto questo, e ricostruiti i multipletti irriducibili mediante J_-, avremo il risultato generale

$$U(R)\,|j, m, \tau\rangle = \sum_{m'=-j}^{j} |j, m', \tau\rangle\, D^{(j)}_{m'm}(R)\,. \tag{8.36}$$

8.2.6. Spettro del momento angolare orbitale. Un esempio immediato di quanto appena detto è fornito proprio dal punto materiale, nel qual caso la rappresentazione unitaria $R \to U(R)$ è quella definita su $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)$ dalla relazione (8.11). In essa L^2 è l'operatore di Casimir, per cui i suoi autovalori devono essere della forma $j(j+1)$, con $j = n/2$ e n intero non negativo. Dato che sappiamo già (vedi §8.1) che L_z ha tutti gli interi come spettro, il caso di j semintero va escluso.

Dobbiamo inoltre osservare che $\mathbf{L}$ agisce soltanto sul sottospazio di $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)$ che si ottiene ignorando la variabile radiale $r = |\mathbf{x}|$. Esso agisce cioè su $\mathcal{L}_2(S^2)$ lo spazio di Hilbert delle funzioni a modulo quadro sommabile sulla sfera S^2 (con la misura invariante per rotazione ereditata dall'immersione di S^2 nello spazio $\mathbb{R}^3$ con metrica euclidea). In altre parole possiamo scrivere $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3) \sim \mathcal{L}_2(\mathbb{R}_+; r^2 dr) \otimes \mathcal{L}_2(S^2)$, dove $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}_+; r^2 dr)$ è lo spazio di Hilbert delle funzioni a modulo quadro sommabile sulla semiretta positiva, con misura $d\mu(r) = r^2 dr$ (si ricordi lo Jacobiano nel passaggio dalle coordinate cartesiane a quelle sferiche). Evidentemente la decomposizione in rappresentazioni irriducibili delle rotazioni riguarda soltanto

$\mathcal{L}_2(S^2)$, mentre il numero quantico radiale, relativo a $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}_+; r^2 dr)$, è un esempio di numero quantico di tipo τ. Si noti che L^2 e L_z costituiscono un insieme completo di osservabili compatibili per $\mathcal{L}_2(S^2)$.

Infine, dalla soluzione dell'equazione differenziale agli autovalori per L^2, scritto nella forma (8.7), concludiamo che tutti i valori interi non negativi dello spin j compaiono nella decomposizione di $\mathcal{L}_2(S^2)$. Abbiamo perciò

$$\mathcal{L}_2(S^2) \sim \bigoplus_{l=1}^{\infty} \mathcal{V}_l \,,$$

dove $\mathcal{V}_l$ è il sottospazio che ha per base le $2j+1$ armoniche sferiche di peso l, $Y_{lm} = Y_{lm}(\hat{x})$, e che sostiene la rappresentazione irriducibile $D^{(l)}$ delle rotazioni. Possiamo cioè porre

$$Y_{lm}(\hat{x}) = \langle \hat{x} | l, m \rangle \;, \quad \langle l, m | U(R) \left| l', m' \right\rangle = \delta_{ll'} D^{(l)}_{mm'}(R) \;,$$

da cui segue

$$\begin{aligned} (U(R)Y_{lm})(\hat{x}) &= \langle \hat{x} | U(R) | l, m \rangle = Y_{lm}(R^{-1}\hat{x}) \\ &= \sum_{m'=-l}^{l} \langle \hat{x} | l, m' \rangle \left\langle l, m' \right| U(R) | l, m \rangle \\ &= \sum_{m'=-l}^{l} Y_{lm'}(\hat{x}) D^{(l)}_{m'm}(R) \,. \end{aligned} \tag{8.37}$$

PROBLEMA 8.2-5 []Calcolare la relazione esistente tra gli elementi di matrice $D^{(l)}_{m'm}(R)$ delle rappresentazioni irriducibili e le armoniche sferiche $Y_{lm}(\hat{x})$.

SOLUZIONE *[]Parametrizziamo come di consueto il generico punto $\hat{x}$ della sfera S^2 in termini degli angoli sferici, vale a dire $\hat{x} = (\sin\vartheta\cos\varphi, \sin\vartheta\sin\varphi, \cos\vartheta)$. Quindi consideriamo la rotazione $R_x = R(\hat{x} \wedge \boldsymbol{e}_z, \vartheta)$ che porta $\hat{x}$ nel versore $\boldsymbol{e}_z$ dell'asse z, ovvero $R_x^{-1}\boldsymbol{e}_z = \hat{x}$. Infine specializziamo la legge di trasformazione* (8.37) *al caso particolare*

$$Y_{lm}(\hat{x}) = Y_{lm}(R_x^{-1}\boldsymbol{e}_z) = \sum_{m'=-l}^{l} Y_{lm'}(\boldsymbol{e}_z) D^{(l)}_{m'm}(R_x) \,.$$

Ora $Y_{lm}(\boldsymbol{e}_z)$ non può dipendere dall'angolo φ e deve quindi essere della forma $c_l \delta_{m0}$, dove la costante c_l è fissata dalla normalizzazione al valore $[(2l+1)/4\pi]^{1/2}$. Si ottiene allora

$$Y_{lm}(\hat{x}) = \left[\frac{2l+1}{4\pi}\right]^{1/2} D^{(l)}_{0\,m}(R_x) \,,$$

che è la relazione cercata. Si noti che il termine a destra è correttamente invariante sotto la modifica $R_x \to R(\boldsymbol{e}_z, \alpha) R_x$ che non cambia la proprietà di ruotare $\hat{x}$ in $\boldsymbol{e}_z$.

8.2.7. Spin ed elicità delle particelle. Abbiamo definito in precedenza come *particella dotata di spin* un sistema fisico per il quale la quadrupla (x, y, z, S_z) costituisce un insieme completo di osservabili compatibili. Evidentemente, il solo S_z è sufficiente per individuare lo stato interno della particella se e solo se la rappresentazione interna finito-dimensionale $D(R)$ è irriducibile, cioè $D(R) = D^{(j)}(R)$ per un certo peso j. In questo caso, al posto di j viene usualmente adoperato il simbolo s, detto *spin della particella*. Esso può essere intero o semintero. In natura si osservano particelle elementari con spin $s = 0$[3], $s = 1/2$, $s = 1$ e $s = 2$ e non oltre (una "spiegazione teorica" di questa limitazione esiste, anche se richiede nozioni che vanno ben oltre lo scopo di questo libro). D'altra parte, riducendo la nostra attenzione a determinate osservabili, possiamo sempre considerare elementari anche particelle composte come i *barioni* (formati da tre *quarks* di spin $1/2$ e quindi con stati di spin fino a $3/2$), o i nuclei o gli stessi atomi, nel qual caso il valore dello spin può essere anche maggiore di 2. Tuttavia non dobbiamo dimenticare che non si tratta più veramente solo dello *spin* ma di una somma di diversi spin e di *momento angolare interno* (ad esempio il momento angolare orbitale degli elettroni attorno al nucleo).

L'esempio primo di particella elementare con spin $1/2$ è l'elettrone, anche se lo spin di un elettrone libero non è realmente osservabile: non risulta significativo, ad esempio, un esperimento di tipo Stern-Gerlach con fasci elettronici. L'evidenza sperimentale dello spin dell'elettrone, una volta opportunamente mediata dalla teoria, è comunque fuori discussione.

Particelle elementari con spin 1 e 2 sono rispettivamente il fotone ed il gravitone, cioè i quanti della radiazione elettromagnetica e della gravitazione. Per i gravitoni però è lecito nutrire dubbi, dato che la situazione, sia sperimentale che teorica, è tutt'altro che ben definita.

Inoltre, strettamente parlando, l'espressione "spin 1 del fotone" non è del tutto corretta. Ad esempio, essa potrebbe far credere che lo spazio degli stati interni di un fotone sia tridimensionale, mentre sappiamo bene che un'onda elettromagnetica si può trovare in solo due stati ortogonali di polarizzazione. Il fatto è che il fotone è una particella di massa nulla, che si muove quindi sempre alla velocità della luce e per la quale non è

[3] In realtà tutte le particelle relativistiche scalari sinora osservate sono sistemi composti, o *stati legati*, di altre particelle dotate di spin $s = 1/2$. Ad esempio il *pione* è formato da un *quark* e da un *antiquark*, che sono *fermioni* (vedi al Cap. 11) di spin $1/2$. Il fatto che queste particelle scalari si dicano egualmente elementari non è solo un retaggio storico risalente a quando erano ritenute "indivisibili": i loro costituenti interagiscono così fortemente da non essere osservabili allo stato libero; in altri termini, non sembra possibile materialmente dividere un pione in quark ed antiquark così come si divide un atomo di idrogeno in protone ed elettrone o un nucleo pesante in nuclei più leggeri nel processo di fissione.

pensabile un'approssimazione non relativistica. La corretta trattazione dello spin del fotone richiede la teoria delle rappresentazioni del gruppo dei movimenti della relatività ristretta (il gruppo di Poincaré) ed esula dai nostri scopi attuali. Qui ci limiteremo ad introdurre la nozione di **elicità**

$$\mathcal{E} = \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} ,$$

che per una generica particella dotata di spin corrisponde alla componente di $\mathbf{S}$ lungo la direzione del moto, cioè del momento $\mathbf{p}$. Come tale l'elicità possiede uno spettro quantizzato in multipli interi o seminteri di $\hbar$. Se la particella è massiva, allora esiste una corrispondenza biunivoca tra gli autostati di $\mathcal{E}$ e quelli, ad esempio, di S_z, per cui $\mathcal{E}$ assume $2s+1$ valori. Se la massa è nulla, invece, lo spin lungo un asse arbitrario non è definito e si dimostra che lo spettro di $\mathcal{E}$ si riduce alle due possibilità estreme $\pm\hbar s$, corrispondenti a $\mathbf{S}$ parallelo o antiparallelo a $\mathbf{p}$.

8.2.8. Relazioni di ortogonalità. Gli elementi di matrice $D^{(j)}_{mm'}(u)$ soddisfano a relazioni di ortogonalità analoghe a quelle valide per le armoniche sferiche (4.9). Queste ultime costituiscono un insieme ortogonale completo sullo spazio di Hilbert $\mathcal{L}_2(S^2)$ delle funzioni a quadrato sommabile sulla sfera. Nel caso di $SU(2)$ è necessario prima di tutto definire il prodotto scalare per funzioni definite sul gruppo:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int d\mu(u) \overline{\psi_1(u)} \psi_2(u) .$$

La misura di integrazione $d\mu$ deve essere invariante per rispettare l'evidente omogeneità del gruppo, per cui tutti i punti dello stesso sono equivalenti e vanno "pesati" allo stesso modo. Non possiamo addentrarci oltre in questo argomento, che richiede un'introduzione alla teoria dei gruppi ben più completa e dettagliata di quanto offerto in questo e nel prossimo capitolo. Per una succinta trattazione dell'argomento rimandiamo all'App. B.1.7.

La relazione di ortogonalità si scrive allora

$$\int d\mu(u)\, \overline{D^{(j_1)}_{m_1 m_1'}(u)}\, D^{(j_2)}_{m_2 m_2'}(u) = \frac{8\pi^2}{2j_1+1}\, \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2} \delta_{m_1' m_2'} \tag{8.38}$$

8.2.9. Rotazioni di 2π. Una rotazione $R(\mathbf{n}, 2\pi)$ di un angolo giro attorno ad un asse arbitrario $\mathbf{n}$ lascia invariato il sistema fisico sotto esame $\mathcal{S}$, qualunque esso sia. Quindi tale rotazione non può avere alcun effetto osservabile e deve indurre una trasformazione unitaria $U(2\pi)$ che lascia invariate tutte le osservabili di $\mathcal{S}$:

$$U(2\pi) A\, U(2\pi)^\dagger = A , \quad \forall A . \tag{8.39}$$

D'altra parte, su stati $|j, m, \tau\rangle$ con momento angolare definito, dalla formula generale (8.36) si trova

$$U(2\pi)\,|j, m, \tau\rangle = (-)^{2j}\,|j, m, \tau\rangle$$

dato che $u(\mathbf{n}, 2\pi) = -1$ e $D^{(j)}(-u) = (-)^{2j} D^{(j)}(-u)$. Quindi $U(2\pi)$ non si riduce all'identità se lo spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ contiene rappresentazioni irriducibili sia di peso intero che di peso semintero.

Dato che $u(4\pi, \mathbf{n}) = 1$, una rotazione di due angoli giro deve invece senz'altro corrispondere all'identità:

$$U(4\pi) = U(2\pi)^2 = \mathbb{1}\,.$$

Introducendo i proiettori

$$Q_\pm = \tfrac{1}{2}[\mathbb{1} \pm U(2\pi)]\,, \quad Q_+ + Q_- = \mathbb{1}\,, \quad Q_+ Q_- = Q_- Q_+ = 0$$

dalla (8.39) abbiamo allora

$$Q_+ A\, Q_- = Q_- A\, Q_+ = 0\,, \quad \forall A\,.$$

Quindi nessuna osservabile può connettere stati con spin intero a stati con spin semintero o viceversa. Questa è la situazione caratteristica della presenza di una regola di superselezione (vedi al §7.5): nel nostro caso essa afferma che alla sovrapposizione lineare di vettori di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ con spin sia intero che semintero non corrisponde alcuno stato puro fisicamente realizzabile. Infatti, se anche $|\psi\rangle$ è tale che sia $|\psi_+\rangle = Q_+\,|\psi\rangle$ che $|\psi_-\rangle = Q_-\,|\psi\rangle$ sono nunnulli, il presunto stato puro $|\psi\rangle\langle\psi|$ non è in alcun modo distinguibile dalla miscela statistica $|\psi_+\rangle\langle\psi_+| + |\psi_-\rangle\langle\psi_-|$, dato che per ogni osservabile A si trova

$$\langle\psi|\,A\,|\psi\rangle = \langle\psi_+|\,A\,|\psi_+\rangle + \langle\psi_-|\,A\,|\psi_-\rangle\ .$$

Dunque solo all'interno di ciascuno dei due sottospazi coerenti $Q_+\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ e $Q_-\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ vale veramente il principio di sovrapposizione lineare.

È facile riformulare questa analisi nel linguaggio più generale delle matrici densità. Se ρ è un arbitrario stato di $\mathcal{S}$ (nel senso che $\rho = \rho^\dagger$, $\rho \geq 0$ e $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$, vedi (7.22)), allora i "blocchi misti" $\rho_{+-} = Q_+ \rho\, Q_-$ e $\rho_{-+} = Q_- \rho\, Q_+$ non contengono alcuna informazione fisica, visto che

$$\mathrm{Tr}\,\rho_{+-} A = \mathrm{Tr}\,\rho_{-+} A = 0\,, \quad \forall A\,.$$

Possiamo perciò fare la scelta più conveniente, $\rho_{+-} = \rho_{-+} = 0$, ovvero $\rho = \rho_{++} + \rho_{--}$. Si noti che questa scelta, fatta ad un certo istante iniziale t_0, resta valida per tutti gli altri tempi, dato che la Hamiltoniana, il generatore dell'evoluzione temporale, è essa stessa una osservabile e commuta perciò con $U(2\pi)$.

8.2.10. Operatori tensoriali irriducibili. La posizione, il momento lineare ed il momento angolare orbitale di una particella, così come il momento angolare totale di un generico sistema $\mathcal{S}$, inteso come generatore delle rotazioni, sono esempi di operatori vettoriali. Un **operatore vettoriale** $\mathbf{A} = (V_1, V_2, V_3) = (V_x, V_y, V_z)$, per definizione si trasforma sotto rotazioni come il vettore coordinato $\mathbf{x}$, vale a dire

$$U(R)^\dagger V_\mu U(R) = R_{\mu\nu} V_\nu \,, \tag{8.40}$$

dove $R \to U(R)$ è la rappresentazione delle rotazioni nello spazio di Hilbert su cui agisce V_μ. Considerando rotazioni infinitesime $R \simeq 1 - i\delta\alpha\boldsymbol{\lambda}\cdot\boldsymbol{\ell}$, $U(R) \simeq \mathbb{1} - i\delta\alpha\boldsymbol{\lambda}\cdot\mathbf{J}$, dalla (8.40) si ottengono subito le regole di commutazione di $\mathbf{V}$ con il momento angolare totale $\mathbf{J}$:

$$[J_\mu, V_\nu] = -(\ell_\mu)_{\nu\sigma} V_\sigma = i\epsilon_{\mu\nu\sigma} V_\sigma \,, \tag{8.41}$$

PROBLEMA 8.2-6 []Si verifichi le relazione (8.40) a partire dalla (8.41) facendo uso dello sviluppo in serie della funzione esponenziale, dalla quale si desume la regola generale

$$e^A B e^{-A} = \sum_{n=0}^{\infty} C_n(A, B) \,.$$

dove $C_n(A, B)$ è il commutatore multiplo:

$$C_{n+1}(A, B) = [a, C_n(A, B)] \,, \quad C_0(A, B) = B \,.$$

(si veda anche l'App. B.1.8).

Se passiamo dalle componenti cartesiane V_x, V_y, V_z a quelle cosiddette *sferiche* $V_{\pm 1} = \mp(V_x \pm iV_y)/\sqrt{2}$, $V_0 = V_z$, possiamo riscrivere le relazioni (8.40) e (8.41) nella forma equivalente

$$U(R)\, V_m\, U(R)^\dagger = \sum_{m'=-1,0,1} V_{m'} D^{(1)}_{m'm}(R)$$
$$[J_\mu, V_m] = \sum_{m'=-1,0,1} V_{m'} D^{(1)}_{m'm}(J_\mu) \,.$$

Generalizzando queste relazioni da $D^{(1)}$ alla rappresentazione irriducibile di peso arbitrario j si ottiene la seguente definizione: un insieme lineare di operatori $T^{(j)}$, con componenti sferiche $T^{(j)}_m$; $m = -j, -j+1, \ldots, j$, si dice **tensoriale irriducibile di peso** j se vale la legge di trasformazione sotto rotazione

$$U(R)\, T^{(j)}_m\, U(R)^\dagger = \sum_{m'=-j}^{j} T^{(j)}_{m'} D^{(j)}_{m'm}(R) \,, \tag{8.42}$$

o, equivalentemente, sono verificate le regole di commutazione con il momento angolare totale

$$[J_\mu, T^{(j)}_m] = \sum_{m'=-j}^{j} T^{(j)}_{m'} D^{(j)}_{m'm}(J_\mu) \,. \tag{8.43}$$

Dalle espressioni (8.34) per gli elementi di matrice di $D^{(j)}(\mathbf{J})$, si ricava una versione più esplicita della relazione (8.43):

$$\begin{aligned} [J_\pm, T^{(j)}_m] &= [(j \mp m)(j \pm m + 1)]^{1/2}\, T^{(j)}_{m\pm 1} \\ [J_z, T^{(j)}_m] &= m\, T^{(j)}_m \,. \end{aligned}$$

In particolare per $j = 0$ si ottiene un **operatore scalare**, che resta invariato sotto una qualunque rotazione:

$$U(R)\, T^{(0)}\, U(R)^\dagger = T^{(0)} \,, \tag{8.44}$$

mentre per $j = 1$ si ottiene un operatore vettoriale.

Esempi di operatori tensoriali irriducibili di peso arbitrariamente grande si ottengono facilmente a partire da operatori vettoriali le cui componenti siano mutualmente compatibili, come la posizione o come il momento di una particella: ponendo

$$T^{(l)}_m = S_{lm}(\mathbf{V}) \,,$$

dove le $S_{lm}(\mathbf{x}) = |\mathbf{x}|^l Y_{lm}(\hat{\mathbf{x}})$ sono le cosiddette *armoniche solide* (si noti che $S_{lm}(\mathbf{x})$ è un polinomio omogeneo di grado l nelle tre componenti di $\mathbf{x}$), si trova

$$\begin{aligned} U(R)\, T^{(j)}_m\, U(R)^\dagger &= S_{lm}(U(R)\, \mathbf{V}\, U(R)^\dagger) \\ &= S_{lm}(R^{-1}\mathbf{V}) = \sum_{m'=-l}^{l} S_{lm'}(\mathbf{V}) D^{(j)}_{m'm}(R) \,, \end{aligned}$$

grazie alle proprietà di trasformazione delle armoniche sferiche. È chiaro che in questo modo si ottengono solo operatori tensoriali di peso intero. D'altronde si tratta di una limitazione del tutto generale se gli operatori $T^{(l)}_m$ sono le componenti sferiche di un insieme tensoriale di osservabili, per le quali deve innanzitutto valere

$$\left(T^{(l)}_m\right)^\dagger = (-1)^{j-m}\, T^{(l)}_{-m}$$

(si confronti questa relazione con quella analoga per la coniugazione complessa delle armoniche sferiche). Infatti sappiamo che ogni osservabile è invariante sotto rotazioni di 2π, vale a dire

$$U(2\pi)\, T^{(j)}_m\, U(2\pi)^\dagger = T^{(j)}_m \,,$$

che è compatibile con la definizione (8.42) solo se $D^{(j)}(R(\mathbf{n}, 2\pi) = 1$, ovvero per j intero.

8.3. Addizione di momenti angolari

Siano $\mathbf{J}_1$ e $\mathbf{J}_2$ due operatori di momento angolare mutualmente compatibili, cioè

$$[\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2] = 0 \,. \tag{8.45}$$

Ad esempio possiamo considerare i momenti angolari orbitali di due punti materiali distinti, oppure il momento angolare totale e lo spin di una particella dotata di spin.

Grazie alla (8.45), l'operatore somma $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$ è anch'esso un operatore di momento angolare, cioè soddisfa alle regole di commutazione (8.24). Quindi $\mathbf{J}$ genera una rappresentazione delle rotazioni. Come già sappiamo, si tratta del prodotto diretto delle due rappresentazioni generate rispettivamente da $\mathbf{J}_1$ e $\mathbf{J}_2$: $U(R) = U_1(R)U_2(R)$. Senza perdita di generalità possiamo assumere che $U_1(R)$ e $U_2(R)$ definiscano due rappresentazioni irriducibili $D^{(j_1)}$ e $D^{(j_2)}$ rispettivamente, vale a dire

$$U_1(R) = D^{(j_1)}(R) \otimes \mathbb{1} \,, \quad U_2(R) = \mathbb{1} \otimes D^{(j_2)}(R) \,,$$

dato che in caso contrario possiamo sempre decomporle prima in componenti irriducibili e considerare poi i prodotti diretti componente per componente (vedi oltre). Dunque per ipotesi J_a^2 vale $j_a(j_a+1)$, $a = 1, 2$.

La rappresentazione $R \to U(R) = D^{(j_1)}(R) \otimes D^{(j_2)}(R)$ è riducibile e si pone in generale il problema di decomporla in rappresentazioni irriducibili. Tale problema è equivalente alla determinazione dei possibili autovalori $J(J+1)$ e dei corrispondenti autovettori del quadrato del momento angolare totale J^2. Gli operatori $U(R)$ agiscono sullo spazio $(2j_1+1)(2j_2+1)$-dimensionale linearmente generato dagli autovettori simultanei di J_{1z} e J_{2z}, cioè $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \equiv |m_1, m_2\rangle$ (essendo j_1 e j_2 fissati *ab initio* possiamo evitare di esplicitarli). $J_z = J_{1z} + J_{1z}$ è ovviamente diagonale in questa base, con autovalori $M = m_1 + m_2$. Se rappresentiamo i vettori ortonormali $|m_1, m_2\rangle$ come punti di un reticolo quadrato, otteniamo lo schema della figura 8-1. Si vede chiaramente che ciascun autovalore M ha una certa degenerazione: in particolare, solo l'autovettore $|j_1, j_2\rangle$ ha l'autovalore $M = j_1 + j_2$, mentre vi sono due autostati con autovalore $M = j_1 + j_2 - 1$, tre con autovalore $M = j_1 + j_2 - 2$ e così di seguito fino a $M = |j_1 - j_2|$, cui corrispondono $2\min(j_1, j_2)$ autovettori. Questa degenerazione massima resta costante mentre M decresce fino a $M = -|j_1 - j_2|$, dopo di che essa diminuisce come M sinché $M = -j_1 - j_2$, che è l'autovalore più piccolo, e non degenere, di J_z. Evidentemente la degenerazione

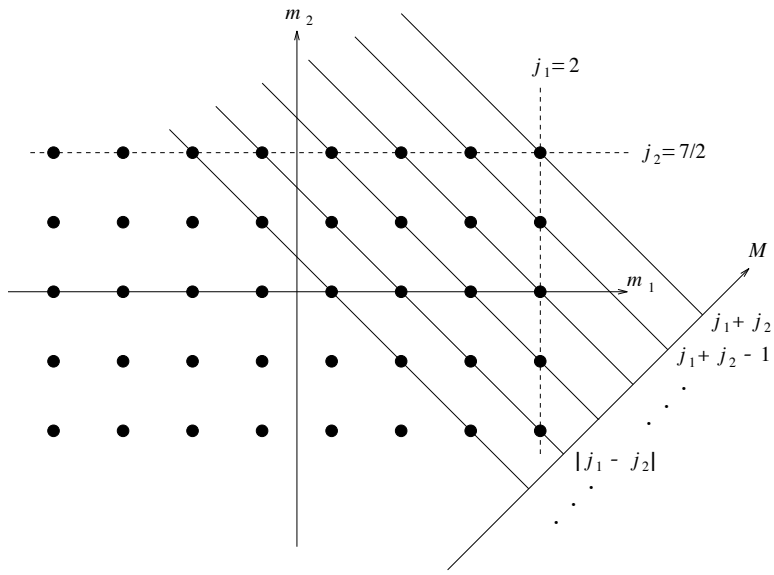


FIGURA 8-1. *Addizione di momenti angolari quantistici.*

degli autovalori di J_z corrisponde ai distinti autovalori di J^2. Denotiamo con $\mathcal{W}_J$ il sottospazio linearmente generato dai vettori $|m_1, m_2\rangle$ con $m_1 + m_2 = J$. Esso contiene tutti gli autovettori di J_z con autovalore $M = J$. L'operatore di innalzamento $J_+ = J_{1+} + J_{1+}$ per costruzione applica $\mathcal{W}_J$ in $\mathcal{W}_{J+1}$. Dato che $\dim \mathcal{W}_{J+1} = \dim \mathcal{W}_J - 1$ per $|j_1 - j_2| \le J \le j_1 + j_2$, deve necessariamente esistere un vettore $|\psi\rangle$ di $\mathcal{W}_J$ annichilato da J_+, $J_+|\psi\rangle = 0$. Usando la solita relazione quadratica $J_- J_+ = J^2 - J_z(J_z - 1)$ otteniamo subito che $|\psi\rangle$ è un autovettore di J^2 con autovalore $J(J+1)$. Quindi, in base all'analisi generale del §8.2.5, $|\psi\rangle$ è l'autovettore di peso

massimo di un multipletto di $2J+1$ autovettori tutti con lo stesso autovalore $J(J+1)$ di J^2 e con autovalore M di J_z che varia da $-J$ a J. Poniamo allora $|\psi\rangle = |J,J\rangle$, dove il primo J si riferisce all'autovalore $J(J+1)$ di J^2 ed il secondo all'autovalore $M = J$ di J_z. Gli altri vettori del multipletto saranno quindi $|J,M\rangle$, $-J \le M \le J-1$ ed insieme a $|J,J\rangle$ generano linearmente il sottospazio $\mathcal{V}_J$, $|j_1 - j_2| \le J \le j_1 + j_2$, che sostiene la rappresentazione irriducibile $D^{(J)}$ di $SU(2)$. Abbiamo dunque dimostrato che

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_1)} \sim \bigoplus_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D^{(J)} .$$

Come anticipato, possiamo utilizzare questo risultato per decomporre il prodotto diretto di rappresentazioni riducibili, dato che la somma diretta è distributiva rispetto al prodotto diretto. Così, se al posto di $D^{(j_1)}$ avessimo la somma $D^{(j_1)} \oplus D^{(j_1')}$, otterremmo

$$\begin{aligned}\big([j_1] \oplus [j_1']\big) \otimes [j_2] &\sim \big([j_1] \otimes [j_2]\big) \oplus \big([j_1'] \otimes [j_2]\big)] \\ &\sim \left(\bigoplus_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} [J]\right) \oplus \left(\bigoplus_{J=|j_1'-j_2|}^{j_1+j_2} [J]\right) ,\end{aligned}$$

dove abbiamo introdotto la notazione alternativa $[j] \equiv D^{(j)}$. Un caso di questo tipo si incontra nella decomposizione del prodotto diretto di tre rappresentazioni irriducibili,

$$\begin{aligned}[j_1] \otimes [j_2] \otimes [j_3] &\sim \big([j_1] \otimes [j_2]\big) \otimes [j_3] \\ &\sim \bigoplus_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \left(\bigoplus_{J'=|J-j_3|}^{J+j_3} [J']\right) ,\end{aligned} \tag{8.46}$$

che è rilevante nell'addizione di tre momenti angolari indipendenti. Si noti che nella doppia sommatoria diretta in Eq. (8.46), una stessa rappresentazione irriducibile $[\bar{J}]$ può comparire più volte, segnalando la degenerazione della coppia di autovalori $(\bar{J}, M)$ di J^2 e J_z.

PROBLEMA 8.3-7 []Si sviluppino in rappresentazioni irriducibili i tripli prodotti $[\frac{1}{2}]^{\otimes 3} \equiv [\frac{1}{2}] \otimes [\frac{1}{2}] \otimes [\frac{1}{2}]$ e $[1]^{\otimes 3}$.

8.3.1. Coefficienti di Clebsh-Gordan. I vettori $|m_1, m_2\rangle$ formano per costruzione una base ortonormale in $D^{(j_1)} \otimes D^{(j_1)}$. Anche i vettori $|J,M\rangle$, una volta normalizzati, formano una base ortonormale nello stesso spazio. Le due basi devono quindi essere collegate da una trasformazione unitaria:

$$|J,M\rangle = \sum_{m_1,m_2} |m_1,m_2\rangle \langle m_1,m_2|J,M\rangle . \tag{8.47}$$

I prodotti scalari $\langle m_1, m_2 | J, M\rangle$ che caratterizzano questa trasformazione si dicono **coefficienti di Clebsch-Gordan**. La notazione più appropriata è quella completa, $\langle j_1, m_1; j_2, m_2 | J, M\rangle$ (o addirittura la più pedante $\langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j_1, j_2; J, M\rangle$) dato che essi variano al variare di j_1 e j_2. Si noti che, per definizione, i coefficienti di Clebsch-Gordan sono diversi da zero solo se $m_1 + m_2 = M$, $|j_1 - j_2| \le J \le |j_1 + j_2|$ e la somma $j_1 + j_2 + J$ è un intero.

Si osservi inoltre che le fasi dei vettori $|J, M\rangle$, che sono definiti solamente come autovettori di certi operatori, non sono a priori fissate. Per quanto riguarda le fasi all'interno di ciascun multipletto irriducibile (cioè J fissato e solo M variabile), possiamo far ricorso alla convenzione standard delle rappresentazioni irriducibili (vedi Eq. (8.33)), mentre restano indeterminate le fasi per M fissato e J variabile. Per fissare anche queste ultime in modo conveniente, ad esempio per ottenere coefficienti di Clebsch-Gordan tutti reali, applichiamo $J_+ = J_{1+} + J_{2+}$ alla relazione (8.47) e contraiamo il risultato con $\langle m_1, m_2|$. Si ottengono così le regole di ricorrenza

$$\begin{aligned}
&[J(J+1) - M(M+1)]^{1/2} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | J, M+1\rangle \\
&\qquad = [j_1(j_1+1) - m_1(m_1-1)]^{1/2} \langle j_1, m_1 - 1; j_2, m_2 | J, M\rangle \\
&\qquad + [j_2(j_2+1) - m_2(m_2-1)]^{1/2} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 - 1 | J, M\rangle \ .
\end{aligned} \tag{8.48}$$

Analogamente, utilizzando $J_- = J_{1-} + J_{2-}$, ri ricava

$$\begin{aligned}
&[J(J+1) - M(M-1)]^{1/2} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | J, M-1\rangle \\
&\qquad = [j_1(j_1+1) - m_1(m_1+1)]^{1/2} \langle j_1, m_1 + 1; j_2, m_2 | J, M\rangle \\
&\qquad + [j_2(j_2+1) - m_2(m_2+1)]^{1/2} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 + 1 | J, M\rangle \ .
\end{aligned} \tag{8.49}$$

Quando $M = J$, le relazioni (8.48) permettono di calcolare per iterazione tutti i coefficienti della forma $\langle j_1, m_1; j_2, J - m_1 | J, J\rangle$, a partire da $\langle j_1, j_1; j_2, J - j_1 | J, J\rangle$. Quindi applicando l'Eq. (8.49), a cominciare da $\langle j_1, m_1; j_2, J - m_1 | J, J\rangle$, si ottengono tutti gli altri coefficienti. Essi risultano tutti reali non appena $\langle j_1, j_1; j_2, J - j_1 | J, J\rangle$ è scelto reale per ogni valore di J. Per convenzione esso viene anche assunto positivo.

Come applicazione particolare delle regole di ricorrenza (8.49) consideriamo il caso $j_1 = l$ e $j_2 = 1/2$, che per l intero è rilevante nello studio dell'interazione **spin-orbita** (vedi §13.3). Ponendo $J = l + 1/2$ (l'altro caso possibile è $J = l - 1/2$) e $m_2 = 1/2$, nelle (8.49), si ottiene la regola di ricorrenza in M

$$\langle l, M - \tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} | J, M\rangle = \left[\frac{l + M + \frac{1}{2}}{l + M + \frac{3}{2}}\right]^{1/2} \langle l, M + \tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} | J, M+1\rangle \ ,$$

che una volta iterata fino a raggiungere il massimo valore di M, implica (si notino le semplificazioni telescopiche tra numeratori e denominatori)

$$
\begin{aligned}
&\left\langle l, M-\tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \middle| l+\tfrac{1}{2}, M \right\rangle \\
&= \left[\frac{l+M+\frac{1}{2}}{l+M+\frac{5}{2}}\right]^{1/2} \left\langle l, M+\tfrac{3}{2}; \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \middle| l+\tfrac{1}{2}, M+2 \right\rangle \\
&= \left[\frac{l+M+\frac{1}{2}}{2l+1}\right]^{1/2} \left\langle l, l; \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \middle| l+\tfrac{1}{2}, l+\tfrac{1}{2} \right\rangle \\
&= \left[\frac{l+M+\frac{1}{2}}{2l+1}\right]^{1/2} .
\end{aligned}
\tag{8.50}
$$

PROBLEMA 8.3-8 []Si verifichi che i coefficienti di Clebsch-Gordan relativi ai casi rimanenti (ovvero $J = l+1/2$, $m_2 = -1/2$ e $J = l-1/2$, $m_2 = \mp 1/2$) valgono rispettivamente

$$
\begin{aligned}
&\left\langle l, M+\tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \middle| l+\tfrac{1}{2}, M \right\rangle = \left[\frac{l-M+\frac{1}{2}}{2l+1}\right]^{1/2} \\
&\left\langle l, M\pm\tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \middle| l-\tfrac{1}{2}, M \right\rangle = \pm\left[\frac{l\pm M+\frac{1}{2}}{2l+1}\right]^{1/2} .
\end{aligned}
\tag{8.51}
$$

Si noti che i quattro coefficienti in questione formano una matrice ortogonale 2×2 per ogni M. Per definizione essi definiscono una matrice unitaria; la riduzione a una matrice reale ortogonale è conseguenza della convenzione adottata per le fasi. Si tratta di un risultato generale, valido per ogni j_1 e j_2. Nel caso in esame, $j_1 = l$ e $j_2 = 1/2$, questo permette di ottenere le (8.51) direttamente dalla (8.50), senza fare più uso delle regole di ricorrenza.

Nel caso più semplice le relazioni (8.50) e (8.51) descrivono la composizione di due spin $1/2$. Adottando la notazione abbreviata $\left|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle = |\pm\rangle$ per indicare i due vettori di stato di un singolo spin, otteniamo le espressioni per il cosiddetto **tripletto** con spin totale $J = 1$

$$
|1,1\rangle = |{+}{+}\rangle \qquad |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|{+}{-}\rangle + |{-}{+}\rangle\right) , \quad |1,-1\rangle = |{-}{-}\rangle
$$

e per il **singoletto** con spin totale nullo

$$
|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|{+}{-}\rangle - |{-}{+}\rangle\right) .
$$

8.3.2. Il teorema di Wigner-Eckart. I coefficienti di Clebsch-Gordan possono essere facilmente messi in relazione con il prodotto diretto di

rappresentazioni unitarie irriducibili. Infatti abbiamo, per ogni rotazione R,

$$U(R)\,|J,M\rangle = \sum_{M'=-J}^{J} |J,M'\rangle\, D^{(J)}_{M'M}(R)$$

da un lato, e

$$U(R)\,|j_1,m_1;j_2,m_2\rangle = \sum_{m_1',m_2'} |j_1,m_1';j_2,m_2'\rangle\, D^{(j_1)}_{m_1'm_1}(R) D^{(j_2)}_{m_2'm_2}(R)$$

dall'altro. Utilizzando quindi la relazione (8.47) per $|J,M\rangle$ e $|J,M'\rangle$ si ottiene

$$\begin{aligned}\sum_{m_1,m_2}\sum_{m_1',m_2'} &|j_1,m_1';j_2,m_2'\rangle\, D^{(j_1)}_{m_1'm_1}(R) D^{(j_2)}_{m_2'm_2}(R)\,\langle j_1,m_1;j_2,m_2|J,M\rangle \\ &= \sum_{M'}\sum_{m_1,m_2} |j_1,m_1;j_2,m_2\rangle\,\langle j_1,m_1;j_2,m_2|J,M'\rangle\, D^{(J)}_{M'M}(R)\,,\end{aligned}$$

da cui segue, eguagliando separatamente i coefficienti dei vettori ortonormali $|j_1,m_1;j_2,m_2\rangle$

$$\begin{aligned}\sum_{m_1,m_2} &\langle j_1,m_1;j_2,m_2|J,M\rangle\, D^{(j_1)}_{m_1'm_1}(R) D^{(j_2)}_{m_2'm_2}(R) \\ &= \sum_{M'} \langle j_1,m_1';j_2,m_2'|J,M'\rangle\, D^{(J)}_{M'M}(R)\,,\end{aligned}$$

ovvero, per via della ortonormalità dei coefficienti di Clebsch-Gordan,

$$\begin{aligned}&D^{(j_1)}_{m_1'm_1}(R) D^{(j_2)}_{m_2'm_2}(R) \\ &= \sum_{M'}\sum_{J}\sum_{M} \langle j_1,m_1';j_2,m_2'|J,M'\rangle D^{(J)}_{M'M}(R)\,\langle J,M|j_1,m_1;j_2,m_2\rangle\,.\end{aligned} \tag{8.52}$$

Evidentemente quest'ultima relazione, detta anche **serie di Clebsch-Gordan**, esprime esplicitamente la decomposizione del prodotto diretto $D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)}$ in rappresentazioni irriducibili $D^{(J)}$. Si ricordi che, per definizione, i coefficienti di Clebsch-Gordan sono diversi da zero solo se $m_1 + m_2 = M$, $|j_1 - j_2| \le J \le |j_1 + j_2|$ e la somma $j_1 + j_2 + J$ è un intero.

Combinando la decomposizione (8.52) con le relazioni di ortogonalità (8.38), si ottiene la segeuente regola per l'integrazione su $SU(2)$ di tre rappresentazioni unitarie irriducibili:

$$\begin{aligned}&\int d\mu(u)\overline{D^{(J)}_{M'M}(u)} D^{(j_1)}_{m_1'm_1}(u) D^{(j_2)}_{m_2'm_2}(u) \\ &= \frac{8\pi^2}{2J+1}\,\langle j_1,m_1';j_2,m_2'|J,M'\rangle\,\langle J,M|j_1,m_1;j_2,m_2\rangle\,.\end{aligned} \tag{8.53}$$

Questo risultato ci permette di dimostrare immediatamente il seguente :

Teorema di Wigner-Eckart []Sia $T^{(j)}$ un insieme tensoriale irriducibile di operatori di spin j e $\{|J, M, \tau\rangle\}$ una base di autostati del momento angolare totale. Allora gli elementi di matrice di $T^{(j)}_m$ sono proporzionali ai coefficienti di Clebsch-Gordan, cioè

$$\langle J, M, \tau | T^{(j)}_m | J', M', \tau' \rangle = \langle J, \tau \| T^{(j)}_m \| J', \tau' \rangle \langle J, M | j, m; J', M' \rangle \ , \tag{8.54}$$

dove i fattori di proporzionalità $\langle J, \tau \| T^{(j)}_m \| J', \tau' \rangle$ prendono il nome di **elementi di matrice ridotti** e non dipendono da m, M o M'.

Infatti, dalle proprietà che definiscono $T^{(j)}$ e $\{|J, M, \tau\rangle\}$ abbiamo, per un'arbitraria rotazione R,

$$\begin{aligned} &\langle J, M, \tau | T^{(j)}_m | J', M', \tau' \rangle \\ &= \langle J, M, \tau | U(R)^\dagger U(R) T^{(j)}_m U(R)^\dagger U(R) | J', M', \tau' \rangle \\ &= \sum_q \sum_{m'} \sum_{q'} \langle J, q, \tau | T^{(j)}_{m'} | J', q', \tau' \rangle \overline{D^{(J)}_{qM}(R)} D^{(j)}_{m'm}(R) D^{(J')}_{q'M'}(R) \ . \end{aligned}$$

Integrando su R (su $u \in SU(2)$ per l'esattezza), dalla formula (8.53) ricaviamo subito la tesi del teorema con l'identificazione

$$\langle J, \tau \| T^{(j)}_m \| J', \tau' \rangle = \sum_{m'} \sum_q \sum_{q'} \langle j, m'; J', q' | J, q \rangle \langle J, q, \tau | T^{(j)}_{m'} | J', q', \tau' \rangle \ .$$

Evidentemente questa identificazione, che è "auto-referente", di per se stessa non ci consente di semplificare il calcolo degli elementi di matrice di $T^{(j)}$. La strategia corretta consiste nel calcolare gli elementi di matrice ridotti attraverso lo stesso teorema di Wigner-Eckart, facendo una scelta opportuna di m, M' e M.

Consideriamo una serie di esempi, cominciando con il caso più semplice di un operatore *scalare* $T^{(0)}$ (vedi (8.44)): in base al teorema di Wigner-Eckart abbiamo

$$\langle J, M, \tau | T^{(0)} | J', M', \tau' \rangle = \langle J, \tau \| T^{(0)} \| J', \tau' \rangle \delta_{JJ'} \delta_{MM'}$$

dato che $\langle J, M | 0, 0; J', M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}$. Quindi, ad esempio

$$\langle J, \tau \| T^{(0)} \| J, \tau' \rangle = \langle J, 0, \tau | T^{(0)} | J, 0, \tau' \rangle \ .$$

Un secondo esempio è costituito dalle componenti sferiche $J^{(1)}_m$, $m = -1, 0, +1$ dello stesso momento angolare totale $\mathbf{J}$. In questo caso possiamo scrivere

$$\langle J, M, \tau | J^{(1)}_m | J', M', \tau' \rangle = \langle J, \tau \| J \| J', \tau' \rangle \langle J, M | 1, m; J', M' \rangle \ . \tag{8.55}$$

Quindi, ponendo $q = 0$ e ricordando che (N.B.: $J^{(1)}_0 \equiv J_z$)

$$\langle J, M, \tau | J^{(1)}_0 | J', M', \tau' \rangle = M \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \delta_{\tau\tau'} \ ,$$

con la scelta più conveniente $M = M' = J = J'$, si ottiene

$$\langle J, \tau \| J \| J', \tau' \rangle = [J(J+1)]^{1/2} \delta_{JJ'} \delta_{\tau\tau'} , \tag{8.56}$$

dove l'unico coefficiente di Clebsch-Gordan che è stato necessario calcolare si riduce a

$$\langle J, J | 1, 0; J, J \rangle = \left[\frac{J}{J+1} \right]^{1/2} .$$

Naturalmente il risultato finale per gli elementi di matrice di $J_m^{(1)}$ concorda con le formule generali (8.34) valide per tutte le rappresentazioni unitarie irriducibili delle rotazioni.

Il seguente risultato costituisce un terzo esempio dell'applicazione del teorema di Wigner-Eckart:

Teorema 8.3.1 [] Gli elementi di matrice $\langle J, M, \tau | \mathbf{V} | J', M', \tau' \rangle$ di un generico operatore vettoriale $\mathbf{V}$ tra stati con lo stesso spin J sono proporzionali ai medesimi elementi di matrice del momento angolare totale $\mathbf{J}$.

Infatti abbiamo, dalle (8.54), (8.55) e (8.56)

$$\begin{aligned} \langle J, M, \tau | V_m | J, M', \tau' \rangle &= \langle J, \tau \| V \| J, \tau' \rangle \langle J, M | 1, m; j, M' \rangle \\ &= \frac{\langle J, \tau \| V \| J, \tau \rangle}{[J(J+1)]^{1/2}} \langle J, M, \tau | J_m | J, M', \tau' \rangle . \end{aligned}$$

Inoltre gli elementi di matrice ridotti $\langle J, \tau \| V \| J, \tau' \rangle$ sono riconducibili agli elementi di matrice, che sono di solito più facili da calcolare, dell'operatore scalare

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{V} = \sum_m (-1)^m J_{-m} V_m .$$

Esplicitamente:

$$\begin{aligned} \langle J, \tau \| \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} \| J, \tau' \rangle &= \langle J, M, \tau | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | J, M, \tau' \rangle \\ = \sum_m (-1)^m \sum_{\tau'' J'' M''} & \langle J, M, \tau | J_{-m} | J'', M'', \tau'' \rangle \langle J'', M'', \tau'' | V_m | J, M, \tau' \rangle \\ &= [J(J+1)]^{1/2} \langle J, \tau \| V \| J, \tau' \rangle \times \\ \sum_m (-1)^m \sum_{M''} & \langle J, M | 1, -m; j, M'' \rangle \langle J, M'' | 1, m; j, M \rangle . \end{aligned}$$

La doppia sommatoria fra parentesi si calcola sostituendo lo stesso $\mathbf{J}$ a $\mathbf{V}$ e vale semplicemente 1, per cui abbiamo il risultato finale

$$\langle J, M, \tau | \mathbf{V} | J, M', \tau' \rangle = \frac{\langle J, \tau \| \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} \| J, \tau' \rangle}{J(J+1)} \langle J, M | \mathbf{J} | J, M' \rangle \tag{8.57}$$

In generale l'operatore vettoriale $\mathbf{V}$ possiede elementi di matrice nonnulli anche tra stati con spin J e J' differenti (comunque $|J - J'| \leq 1$ per il teorema di Wigner-Eckart). In certi casi particolari gli unici elementi di

matrice non-nulli sono proprio quelli con $|J - J'| = 1$, come nel caso della posizione $\mathbf{x}$ e del momento $\mathbf{p}$ per il sistema costituito da un singolo punto materiale. Infatti $\mathbf{J} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{p} = 0$ se $\mathbf{J} = \mathbf{L} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{p}$. $\mathbf{x}$ e $\mathbf{p}$ sono esempi di *vettori polari*, mentre $\mathbf{J}$, che evidentemente ha elementi di matrice non-nulli solo per $J = J'$ è un *vettore assiale*. La definizione generale verrà data nel prossimo capitolo in relazione alla *trasformazione di parità* (vedi §9.5.1); allora l'annullarsi di certi elementi di matrice sarà fatta discendere da certe proprietà di simmetria degli stati e degli operatori.

PROBLEMA 8.3-9 []Dato il prodotto tensoriale $D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)}$ di due rappresentazioni unitarie irriducibili delle rotazioni, si calcolino gli elementi di matrice degli operatori di momento angolare parziale $\mathbf{J}_1$ e $\mathbf{J}_2$ tra autostati del momento angolare totale $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$. (N.B.: si tratta di una applicazione diretta della formula generale (8.57).)

8.3.3. Simboli 3-j. Al posto dei coefficienti di Clebsch-Gordan vengono di sovente adoperati altri coefficienti, dotati di maggiori proprietà di simmetria, i cosiddetti **simboli 3-j**. Essi si scrivono

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2-m_3}}{\sqrt{2j_3+1}} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j_3, -m_3 \rangle \tag{8.58}$$

e sono diversi da zero solo se $m_1 + m_2 + m_3 = 0$ e j_1, j_2, j_3 formano i tre lati di un triangolo con perimetro pari ad un intero. I simboli 3-j posseggono le seguenti simmetrie (per brevità indichiamo con $(1,2,3)$ il simbolo 3-j (8.58)):

$$(1,2,3) = (3,1,2) = (2,3,1) \tag{8.59}$$

$$(1,3,2) = (2,1,3) = (3,2,1) = (-1)^{j_1+j_2+j_3}(1,2,3) \tag{8.60}$$

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3}(1,2,3)\ . \tag{8.61}$$

I simboli 3-j possono essere definiti *ab initio* come componenti, a valori reali e dotati delle proprietà di simmetria (8.59), dello scalare ottenuto dal prodotto diretto di tre vettori di stato appartenenti a rappresentazioni irriducibili con spin j_1, j_2 e j_3, ovvero

$$|0,0\rangle = \sum_{m_1,m_2,m_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} |j_1, m_1; j_2, m_2; j_3, m_3\rangle\ .$$

Quindi essi devono soddisfare all'identità

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1' & m_2' & m_3' \end{pmatrix} =$$

$$= \sum_{m_1,m_2,m_3} D^{(j_1)}_{m_1' m_1}(R)\, D^{(j_2)}_{m_2' m_2}(R)\, D^{(j_3)}_{m_1' m_3}(R) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

per ogni rotazione R.

CAPITOLO 9

Simmetria e invarianza

In questo capitolo ci proponiamo di illustrare il ruolo fondamentale che rivestono i principi di simmetria e di invarianza nel formalismo generale della meccanica quantistica. Abbiamo già avuto modo di accennare al problema nei precedenti capitoli (ad esempio al §7.6 e §7.6.3) e procediamo ora alla trattazione generale. Track 2

Innanzitutto occorre fare una distinzione ben precisa tra i due aspetti della questione: quello che potremmo definire statico-cinematico e quello dinamico. Sia ben chiaro che la stessa distinzione sussiste anche in meccanica classica; nella sua formulazione più generale, quella basata sulla nozione di spazio delle fasi $\mathcal{F}$, le trasformazioni di simmetria al livello statico-cinematico sono tutte e sole le trasformazioni canoniche, cioè le applicazioni biunivoche di $\mathcal{F}$ in se stesso che, preservando la struttura simplettica di $\mathcal{F}$ (ovvero lasciando invariate le parentesi di Poisson tra le coordinate canoniche), garantiscono la *covarianza* (cioè l'invarianza in forma) delle equazioni del moto di Hamilton. Questa è la condizione necessaria e sufficiente affinché una generica trasformazione su $\mathcal{F}$ possa essere una simmetria della *descrizione* del moto secondo la meccanica classica. In secondo luogo, si pone la questione di controllare le proprietà di trasformazione dell'Hamiltoniana: se essa risulta invariante, allora la trasformazione in questione preserva la dinamica, ovvero permette di costruire nuove soluzioni del moto a partire da date soluzioni del moto: si tratta di una simmetria del *moto* e non solo della descrizione dello stesso. Inoltre, nel caso di gruppi continui di trasformazioni, ad ogni simmetria dell'Hamiltoniana (cioè ad ogni trasformazione di simmetria che lascia invariata l'Hamiltoniana) risulta associata una legge di conservazione (vedi al cap. 1).

Volendo estendere queste considerazioni alla meccanica quantistica, la prima questione a cui rispondere riguarda la determinazione di che cosa una trasformazione di simmetria deve lasciare invariato: si tratta cioè di identificare l'analogo quantistico della struttura simplettica dello spazio delle fasi classico. Ricordiamo che, secondo i principi della meccanica quantistica discussi nel cap. 7, ad ogni sistema fisico $\mathcal{S}$ è associato uno spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, i cui raggi unitari sono in corrispondenza biunivoca

con gli stati puri di $\mathcal{S}$. Si rammenti inoltre che $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ si intende individuato operativamente: ogni vettore di stato $|\psi\rangle$ in $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ è per ipotesi autovettore di un opportuno insieme completo di osservabili compatibili, i cui valori sono per definizione sperimentalmente misurabili mediante adeguati apparati ed operazioni. In altre parole, ogni raggio di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ può essere sempre, almeno in linea di principio, "preparato" come stato iniziale del sistema $\mathcal{S}$ (le modifiche di queste affermazioni nel caso che esistano regole di superselezione sono lasciate al lettore). Infine, tutte le informazioni oggettivamente disponibili sul sistema $\mathcal{S}$, cioè le distribuzioni di probabilità delle varie osservabili, sono contenute nei moduli quadri dei prodotti scalari fra vettori di stato normalizzati (le cosiddette probabilità di transizione), che come sappiamo dal §7.2 definiscono la struttura metrica dello spazio proiettivo dei raggi $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}/\mathbb{C}^*$.

9.1. Trasformazioni di simmetria

La domanda che sorge ora spontanea è la seguente: quanto universale è lo schema generale appena (molto sommariamente) riassunto, entro il quale viene descritto il sistema fisico $\mathcal{S}$? La questione è di centrale importanza, poiché fa riferimento alle caratteristiche di oggettività della descrizione quantomeccanica dei fenomeni fisici. In linea di principio, due diversi osservatori alle prese con il medesimo sistema $\mathcal{S}$ possono seguire linee completamente diverse per ricostruire lo spazio degli stati puri di $\mathcal{S}$, cioè studiare differenti osservabili con differenti procedure sperimentali. Una volta accertata da entrambi la validità dei postulati fondamentali della meccanica quantistica, resta il problema di confrontare i due insiemi di previsioni teoriche e dati sperimentali. Per tale scopo, *una volta assunta l'equivalenza dei due osservatori*, è necessario che i due spazi di Hilbert da essi ricostruiti siano isomorfi, nel senso di costituire due rappresentazioni eventualmente diverse dello stesso spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ dei vettori di stato, che esista una esplicita corrispondenza tra i due insiemi di osservabili e di stati puri ed infine che le distribuzioni di probabilità di osservabili corrispondenti siano le stesse. Diremo allora che le descrizioni dei due osservatori sono legate da una *trasformazione di simmetria* T. Per quanto appena detto, e tenendo conto della possibilità di regole di superselezione, vale dunque la definizione

> Una **trasformazione di simmetria** T consiste in una corrispondenza biunivoca tra i raggi di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ che preserva il modulo quadro dei prodotti scalari e rispetta le regole di superselezione.

In dettaglio, questo significa che:

a) Ad ogni stato puro ρ corrisponde uno stato puro $T\rho$ e viceversa, cioè ogni stato puro ρ è l'immagine sotto T di uno stato puro ρ'; in particolare, se $|\psi\rangle$ è un vettore rappresentativo di ρ, vale a dire $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, indicheremo con $|T\psi\rangle$ un vettore rappresentativo di $T\rho$.
b) Per qualunque coppia di stati puri ρ_1 e ρ_2 le probabilità di transizione sono conservate,

$$\mathrm{Tr}\, T\rho_1\, T\rho_2 = |\langle T\psi_1|T\psi_2\rangle|^2 = |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2 = \mathrm{Tr}\,\rho_1\rho_2 \ ,$$

per cui T si configura come una *isometria* dello spazio proiettivo dei raggi $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}/\mathbb{C}^*$; si noti che una tale isometria è necessariamente biunivoca: per la disuguaglianza di Schwartz, ρ_1 e ρ_2 coincidono se e solo se $\mathrm{Tr}\,\rho_1\rho_2 = 1$; quindi se $T\rho_1 = T\rho_2$ allora $1 = \mathrm{Tr}\, T\rho_1\, T\rho_2 = \mathrm{Tr}\,\rho_1\rho_2$ implica $\rho_1 = \rho_2$.
c) A raggi appartenenti ad un dato settore di superselezione $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}^{(q_1,q_2,\dots)}$ (si veda al §7.5) corrispondono raggi appartenenti ad un singolo settore[1].

In base alla definizione appena data, le trasformazioni di simmetria formano un **gruppo** (vedi l'App. B.1): T_2T_1 si ottiene mettendo in corrispondenza secondo T_2 le immagini della prima trasformazione T_1. $T = e$ è la trasformazione identica, che fa corrispondere ogni raggio di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ a se stesso, e T^{-1} la *trasformazione inversa* di T, ovvero la corrispondenza tra raggi letta nel verso opposto. Si noti che una corrispondenza biunivoca tra stati puri implica una corrispondenza biunivoca tra osservabili e viceversa, data la relazione di complementarità tra le due categorie (si riveda la discussione generale del §7.1). In pratica però, sono solo certe corrispondenze tra osservabili quelle più facilmente individuate, in base a principi generali di simmetria spazio-temporale e/o a dirette verifiche operative (si considerino per esempio le proprietà di simmetria e le eventuali degenerazioni negli spettri delle osservabili più rilevanti). Ne segue che gran parte delle trasformazioni di simmetria relative ad un dato sistema $\mathcal{S}$ non hanno alcuna interpretazione fisica diretta né alcuna utilità pratica (lo stesso vale per le trasformazioni canoniche della meccanica classica). Il problema reale consiste nell'identificare e caratterizzare il più completamente possibile tutte quelle trasformazioni tra osservabili la cui interpretazione è chiara e/o la cui esistenza risulta comunque fondamentale per mettere ordine tra la massa di dati accumulati nelle osservazioni. A tale scopo gioca un ruolo fondamentale, come vedremo, la struttura gruppale dell'insieme delle trasformazioni di simmetria.

[1] In caso contrario i nostri due osservatori non si troverebbero d'accordo sulle regole di superselezione, potendo l'uno preparare stati puri che risultano impossibili da preparare per l'altro. Dunque l'immagine sotto T di un settore di superselezione è senz'altro isomorfa al settore originale, anche se non coincide necessariamente con esso, cioè T può non conservare le cariche di superselezione ed i due osservatori non concordare sul loro valore.

Consideriamo ora un semplice esempio. Si supponga che i due suddetti osservatori siano collegati dalla traslazione spaziale $T(\mathbf{a})$, $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^3$, cioè facciano riferimento a due terne di assi coordinati ottenuti l'uno dall'altro mediante lo spostamento rigido $\mathbf{a}$. Osservando lo stesso esperimento, essi attribuiranno al sistema $\mathcal{S}$ in esame differenti stati come risultati della stessa preparazione, dato che diversa è la loro rappresentazione matematica delle osservabili di $\mathcal{S}$. Ad esempio, se $\mathbf{r}_{\text{c.m.}}$ è il centro di massa di $\mathcal{S}$ per il primo, allora $T(\mathbf{a})\,\mathbf{r}_{\text{c.m.}} = \mathbf{r}_{\text{c.m.}} + \mathbf{a}$ è il centro di massa per il secondo, e via dicendo, con un'analoga, precisa corrispondenza per tutte le osservabili. Poiché gli stati sono preparati misurando le osservabili, deve esistere una corrispondenza biunivoca anche tra tutti i possibili stati puri assegnati a $\mathcal{S}$ dai due osservatori. Supponiamo ora che il primo osservatore sia in grado, mediante opportuni arrangiamenti sperimentali, di preparare alternativamente gli stati ortonormali $|\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ e $|\psi_2\rangle\langle\psi_2|$, nonché lo stato $|\psi\rangle\langle\psi|$, con $|\psi\rangle = c_1\,|\psi_1\rangle + c_2\,|\psi_2\rangle$ e $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ (si pensi ad esempio alle varie rotazioni del magnete in un esperimento di Stern-Gerlach). L'altro osservatore, che essendo per ipotesi equivalente al primo applica gli stessi principi generali della meccanica quantistica, assegna agli stati preparati i vettori $|T(\mathbf{a})\psi_1\rangle$, $|T(\mathbf{a})\psi_2\rangle$ e $|T(\mathbf{a})\psi\rangle = c_1'\,|T(\mathbf{a})\psi_1\rangle + c_2'\,|T(\mathbf{a})\psi_2\rangle$. In successive misure, i due osservatori si troveranno d'accordo sui risultati se e solo se $|T(\mathbf{a})\psi_1\rangle$ e $|T(\mathbf{a})\psi_2\rangle$ sono ortonormali e $|c_j'|^2 = |c_j|^2$, $j = 1, 2$. Dato che $c_j = \langle\psi_j|\psi\rangle$, $c_j' = \langle T(\mathbf{a})\psi_j|T(\mathbf{a})\psi\rangle$, e $|\psi\rangle$, $|\psi_j\rangle$ sono vettori rappresentativi di raggi arbitrari di $\mathcal{H}_S$, arriviamo alla richiesta che alla traslazione $T(\mathbf{a})$ corrisponda una trasformazione di simmetria dello spazio degli stati puri di $\mathcal{S}$.

In questo esempio la trasformazione di simmetria che collega le due descrizioni quantomeccaniche prende origine direttamente da una simmetria dello spazio fisico, poiché (almeno per spostamenti $\mathbf{a}$ non troppo grandi) appare ovvio assumere che i due osservatori siano effettivamente equivalenti (questo costituisce un esempio di *principio di simmetria*). Questa interpretazione della simmetria si dice **passiva** in quanto il sistema $\mathcal{S}$ è uno solo e resta inalterato, mentre la traslazione $T(\mathbf{a})$ collega diversi osservatori. Si dice invece **attiva** l'interpretazione opposta, per la quale vi è un solo osservatore che contempla due distinti sistemi fisici ottenuti l'uno dall'altro per traslazione. Entrambe le visioni sono legittime e si traducono in una trasformazione di simmetria del formalismo della meccanica quantistica, in base all'assunzione di omogeneità dello spazio fisico. È inoltre evidente che le due trasformazioni così ottenute sono una

l'inversa dell'altra, dato che, se lo spazio è davvero omogeneo, traslare insieme osservatore e sistema osservato[2] deve tradursi nella trasformazione identica.

Quanto appena detto per le traslazioni suggerisce un'interpretazione attiva di tipo operativo per tutte le trasformazioni di simmetria collegate a simmetrie spazio-temporali. Si tratta, in sostanza, di effettuare (o immaginare di effettuare) determinate operazioni sugli apparati sperimentali atti a preparare il sistema $\mathcal{S}$ in un certo stato. Dopo tali operazioni, gli apparati prepareranno il sistema in uno stato che è legato a quello originale dalla trasformazione di simmetria T che corrisponde alle operazioni fatte.

9.1.1. Il teorema di Wigner. Secondo la definizione presentata nel precedente paragrafo una trasformazione di simmetria è una isometria dello spazio proiettivo dei raggi che rispetta le eventuali regole di superselezione. Un esempio immediato è fornito da una isometria dello spazio di Hilbert stesso, cioè dall'applicazione $|\psi\rangle \mapsto |U\psi\rangle$ che conserva i prodotti scalari

$$\langle U\psi|U\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle \ .$$

Come è noto, una isometria tra spazi di Hilbert è necessariamente un'applicazione lineare, per cui possiamo porre $|U\psi\rangle = U|\psi\rangle$, dove U è un operatore unitario: $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1}$.

D'altro lato, se l'applicazione $|\psi\rangle \mapsto |U\psi\rangle$ non conserva i prodotti scalari, ma li trasforma nei loro complessi coniugati, ovvero

$$\langle U\psi|U\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle = \overline{\langle\psi|\phi\rangle} \ , \tag{9.1}$$

essa definisce ancora una trasformazione di simmetria. Si dimostra facilmente che tale applicazione è *antilineare*, cioè

$$c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle \mapsto \bar{c}_1|U\psi_1\rangle + \bar{c}_2|U\psi_2\rangle \ .$$

Possiamo ancora porre $|U\psi\rangle = U|\psi\rangle$ con la regola $Uc|\psi\rangle = c^*U|\psi\rangle$, $c \in \mathbb{C}$. Insieme con la (9.1) questo definisce U come operatore antiunitario. In entrambi i casi si intende anche che U trasforma ciascun settore $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}^{(q_1,q_2,\dots)}$ in se stesso o interamente in un altro settore, rispettando così le regole di superselezione. L'esempio appena riportato è tutt'altro che limitato, dato il seguente

Teorema di Wigner []Ogni trasformazione di simmetria T in un dato spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ è implementabile mediante una isometria lineare

[2] È importante includere nel complesso osservatore-osservato, oltre a tutto l'apparato sperimentale necessario per le osservazioni, anche tutti gli agenti esterni al sistema $\mathcal{S}$ che potrebbero influenzare la preparazione e le varie misure entro l'accuratezza desiderata. Si pensi ad esempio al campo gravitazionale ed a quello elettromagnetico.

o antilineare U_T tra i settori di superselezione di $\mathcal{H}_S$; l'operatore U_T risulta univocamente fissato da T a meno di un fattore di fase.

Più in dettaglio questo significa che:
a) Per ogni raggio ρ è possibile individuare un vettore rappresentativo $|\psi\rangle$ tale che $U_T|\psi\rangle$ è un vettore rappresentativo di $T\rho$.
b) U_T o è unitario o è antiunitario (si intende che $\dim \mathcal{H}_S > 1$).
c) Se quanto appena detto vale sia per U_T che per U'_T, allora necessariamente $U'_T = e^{i\theta}U_T$.

La dimostrazione di questo teorema, seppure non troppo difficile, è piuttosto lunga e complessa e non sarà qui riportata. Il lettore può trovare un'eccellente esposizione in [**Bar64**]

Si noti che la trasformazione identica $T = e$ è senz'altro implementata da un multiplo unimodulare dell'operatore identità $\mathbb{1}$, dato che le regole gruppali $ee = e$ e $eT = T, \forall T$ escludono l'alternativa antiunitaria. Per convenzione, il suddetto fattore è solitamente fissato uguale a 1.

In sostanza, il teorema di Wigner afferma che le trasformazioni di simmetria sono cambiamenti di base nello spazio di Hilbert dei vettori di stato (con l'aggiunta della coniugazione complessa delle coordinate nel caso di una implementazione antiunitaria). Per la precisione, si tratta sempre di cambiamenti per i quali è possibile stabilire una corrispondenza uno-a-uno tra la nuova base e quella originaria, tale quindi da ammettere sia una interpretazione attiva che una passiva, nel senso puramente matematico già discusso al §7.6.2. Naturalmente questo è automaticamente vero nel caso di basi di vettori propri, dato che tali basi sono numerabili. In particolare, se $\mathcal{H}_S$ è n-dimensionale, il gruppo di tutte le possibili trasformazioni di simmetria coincide con il prodotto diretto di $SU(n)$, il gruppo delle matrici $n \times n$ unitarie e unimodulari, con il gruppo discreto $\{\mathbb{1}, K\}$, dove K è la coniugazione complessa relativa ad una base fissata.

9.1.2. Legge di trasformazione delle osservabili. Consideriamo ora in che modo una trasformazione di simmetria viene implementata al livello delle osservabili o, più generalmente, degli operatori lineari. Le grandezze che dobbiamo prendere in esame sono i moduli quadri delle ampiezze quantomeccaniche, e non le ampiezze stesse come faremmo invece per un semplice cambiamento di base, dato che solo i moduli quadri sono fisicamente osservabili. Come vedremo però, il risultato finale non cambia, confermando l'interpretazione delle trasformazioni di simmetria come riparametrizzazioni unitarie o antiunitarie dello spazio di Hilbert. Assumendo che la trasformazione di simmetria $|\psi\rangle \to |T\psi\rangle$ agisca in senso attivo per i vettori di stato, possiamo definire l'operatore attivamente trasformato TX, a partire da un generico operatore X, nel seguente modo:

$$|\langle\psi|TX|\phi\rangle|^2 = |\langle T\psi|X|T\phi\rangle|^2 , \tag{9.2}$$

dove $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ sono arbitrari vettori di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. Viceversa, dal punto di vista passivo, TX andrebbe identificato con quell'operatore che possiede tra $|T\psi\rangle$ e $|T\phi\rangle$ gli stessi moduli quadri degli elementi di matrice che competono a X tra $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$, ovvero

$$|\langle T\psi|\,TX\,|T\phi\rangle|^2 = |\langle\psi|\,X\,|\phi\rangle|^2 \,.$$

Risulta evidente che

$$(TX)_{\text{attiva}} = (T^{-1}X)_{\text{passiva}} \,.$$

Dal punto di vista operativo la visione passiva per le osservabili è naturalmente coniugata a quella attiva per gli stati: se una certa operazione di simmetria sugli apparati sperimentali che preparano il sistema $\mathcal{S}$ nello stato puro ρ risulta nella preparazione dello stato $T\rho$, mentre gli apparati che eseguono le misurazioni successive restano inalterati, allora le osservabili associate a questi ultimi vanno trasformate in senso passivo, secondo T^{-1}, dato che la stessa operazione di simmetria eseguita su tutti gli apparati, sia di preparazione che di successiva misurazione, deve risultare nella trasformazione identica.

Detto questo, per fissare le idee d'ora in poi considereremo, anche per le osservabili, la formulazione valida per la visione attiva, che possiamo associare alle misurazioni relative alla sola preparazione degli stati (la visione passiva si ottiene in ogni caso tramite la sostituzione $T \to T^{-1}$).

Se la trasformazione di simmetria $|\psi\rangle \to |T\psi\rangle$ è implementata dall'operatore unitario U_T, ovvero $|T\psi\rangle = U_T\,|\psi\rangle$, si può dimostrare che dalla relazione (9.2) segue (l'esercizio è lasciato al lettore)

$$\langle\psi|\,TX\,|\phi\rangle = \langle T\psi|\,X\,|T\phi\rangle \,, \tag{9.3}$$

a meno di un fattore di fase e quindi

$$\boxed{TX = U_T^\dagger\, X\, U_T} \tag{9.4}$$

sempre a meno di un fattore di fase. Si tratta di un fattore di fase relativo unicamente all'operatore X, dato che la (9.4) non dipende dal fattore di fase di U_T lasciato libero dal teorema di Wigner. In ogni caso risulta naturale porre tale fattore di fase uguale ad 1 per $T = e$ e quindi $U_T = \mathbb{1}$. Lo stesso vale allora per ogni altra trasformazione di simmetria T.

Se invece l'implementazione di T è antiunitaria, la relazione (9.3) va sostituita con

$$\langle\psi|\,TX\,|\phi\rangle = \overline{\langle T\psi|\,X\,|T\phi\rangle} \,. \tag{9.5}$$

Ponendo ancora $|T\phi\rangle = U_T\,|\phi\rangle$, con U_T questa volta antiunitario, ed identificando $\langle\psi|\,U_T^\dagger$ con il *bra* corrispondente a $U_T\,|\psi\rangle$, non si riottiene la (9.4), a causa della residua coniugazione complessa. Il problema è

che $\langle\psi|\,U_T^\dagger$ non è un vero *bra*: esso agisce come funzionale antilineare, e non lineare, su $\mathcal{H}_\mathcal{S}$, per cui $(\langle\psi|\,U_T^\dagger)\,|\psi'\rangle$ non coincide con $\langle\psi|\,(U_T^\dagger\,|\psi'\rangle)$, rendendo mal definita l'espressione $\langle\psi|\,U_T^\dagger X U_T\,|\phi\rangle$. Un semplice modo per evitare contraddizioni, ed al contempo mantenere la notazione dei *bra* e *ket*, è di stabilire una volta per tutte che gli operatori antilineari agiscono solo a destra, cioè solo sui *ket*. Possiamo allora *definire* l'operatore aggiunto $U_T^\dagger$ di un U_T antiunitario di modo che

$$\langle\psi|\,U_T^\dagger\,|\psi'\rangle = \langle\psi|\,T^{-1}\psi'\rangle = \overline{\langle T\psi|\psi'\rangle}\,,$$

per ogni coppia $|\psi\rangle$, $|\psi'\rangle$ in $\mathcal{H}_\mathcal{S}$. Con questa convenzione, la relazione (9.4) vale quindi in generale. Inoltre, $U_T^\dagger = U_T^{-1}$ per costruzione. È però importante ricordare che la natura antilineare di un operatore U antiunitario impone precise regole nelle manipolazioni algebriche di operatori. Ad esempio, U non commuta con un c-numero λ, ma lo cambia nel suo complesso coniugato: $U\lambda = \bar{\lambda}U$.

Sfruttando la relazione $U_{T^{-1}} = U_T^{-1} = U_T^\dagger$, la versione passiva della Eq. (9.4) si scrive evidentemente

$$T^{-1}X = U_T\,X\,U_T^\dagger\,. \tag{9.6}$$

Infine, un operatore X si dice *invariante* sotto una trasformazione di simmetria T qualora $TX = X$. Dalle (9.4) o (9.6) si deduce quindi che X è invariante se e solo se esso commuta con U_T.

Possiamo ora ulteriormente verificare come il formalismo matematico della meccanica quantistica implementi in modo assai semplice i concetti di trasformazione di simmetria, sia attiva che passiva. Se $|a\rangle$ è un autovettore dell'osservabile A con autovalore a, $A\,|a\rangle = a\,|a\rangle$ (il che equivale a dire che A assume certamente il valore a nello stato rappresentato da $|a\rangle$), allora $|Ta\rangle = U_T\,|a\rangle$ è un autovettore dell'osservabile passivamente trasformata $T^{-1}A = U_T A U_T^\dagger$ con lo stesso autovalore a:

$$\begin{aligned}(T^{-1}A)\,|Ta\rangle &= U_T A U_T^\dagger U_T\,|a\rangle = U_T A\,|a\rangle = U_T\,a\,|a\rangle \\ &= a U_T\,|a\rangle = a\,|Ta\rangle\ .\end{aligned}$$

D'altra parte, se lo spettro di A sostiene una realizzazione della trasformazione T, per cui $|Ta\rangle$ descrive un autostato di A con autovalore Ta (si pensi ad esempio alle traslazioni spaziali ed all'osservabile posizione), allora l'osservabile attivamente trasformata $TA = U_T^\dagger A U_T$ assume il valore Ta sul vettore originale $|a\rangle$:

$$\begin{aligned}(TA)\,|a\rangle &= U_T^\dagger A U_T\,|a\rangle = U_T^\dagger A\,|Ta\rangle = U_T^\dagger (Ta)\,|Ta\rangle \\ &= (Ta)\,U_T^\dagger\,|Ta\rangle = (Ta)\,\big|T^{-1}Ta\big\rangle = (Ta)\,|a\rangle\ .\end{aligned}$$

Concetti operativi fisicamente tutt'altro che banali sono resi nel formalismo da semplicissimi passaggi algebrici. Questo fornisce un ulteriore sostegno alla corrispondenza tra osservabili e relativi autostati (in senso strettamente operativo) da una parte, ed operatori autoaggiunti e relativi autovettori dall'altra.

In particolare, possiamo controllare le proprietà di covarianza delle equazioni del moto della meccanica quantistica sotto una trasformazione di simmetria. Dall'equazione di Schroedinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$$

si ottiene subito, applicando l'operatore U_T ad entrambi i membri,

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi'\rangle = H' |\psi'\rangle \ , \tag{9.7}$$

dove $|\psi'\rangle = |T\psi\rangle = U_T |\psi\rangle$ e $H' = T^{-1} H = U_T H U_T^\dagger$. Dunque la nuova equazione di Schroedinger ha la stessa forma di quella originale, che è quanto richiesto dalla covarianza. Si noti che lo stesso risultato si ottiene anche più in generale, nel caso in cui U_T dipenda esplicitamente dal tempo: dopo la trasformazione l'equazione di Schroedinger si legge ancora come la (9.7), con la nuova Hamiltoniana data da

$$H' = U_T H U_T^\dagger + i\hbar \frac{\partial U_T}{\partial t} U_T^\dagger \ . \tag{9.8}$$

PROBLEMA 9.1-1 []Si verifichi la covarianza delle equazioni del moto di Heisenberg per le osservabili sotto trasformazioni di simmetria.

Dato che in generale, dal punto di vista pratico, le trasformazioni di simmetria sono individuate da precise corrispondenze tra le osservabili (quasi sempre indotte da certe proprietà spazio-temporali), piuttosto che dalle equivalenti corrispondenze tra stati, la legge di trasformazione (9.4) risulta particolarmente utile per determinare esplicitamente U_T a partire dall'azione di T sulle osservabili. Possiamo limitarci a considerare tale azione su un insieme di osservabili fondamentali $\{A_1, A_2, \ldots\}$, visto che ogni altra osservabile A risulta matematicamente esprimibile in funzione di quelle fondamentali. In effetti, se $A = f(A_1, A_2, \ldots)$, allora $TA = f(TA_1, TA_2, \ldots)$. Quindi, grazie alla (9.4), abbiamo

$$U_T^\dagger A\, U_T = f(U_T^\dagger A_1 U_T, U_T^\dagger A_2 U_T, \ldots) \ ,$$

relazione che spesso si riduce ad una identità, grazie alla particolare forma funzionale di f (ad esempio per f algebrica semplice).

Osserviamo ora che l'implementazione (9.4) della trasformazione di simmetria T, una volta considerata per un insieme di osservabili fondamentali, fissa U_T a meno di un fattore di fase. Se infatti U_T e V_T

implementano entrambi T, avremo

$$TA_j = U_T^\dagger A_j U_T = V_T^\dagger A_j V_T$$

e quindi

$$A_j = T^{-1}TA_j = \left[U_T V_T^{-1}\right]^\dagger A_j U_T V_T^{-1} .$$

Dunque $U_T V_T^{-1}$ commuta con tutte le osservabili fondamentali ed è perciò un multiplo dell'identità, ovvero $V_T = e^{i\alpha} U_T$.

Per costruire U_T esplicitamente, stabilendo tra l'altro la sua natura lineare o antilineare, possiamo far ricorso alle regole di commutazione tra le osservabili fondamentali, che per definizione devono funzionalmente chiudersi sulle stesse A_j e l'identità. Piuttosto che presentare una trattazione in termini generali, necessariamente piuttosto astratta, ci limitiamo qui a riportare la formula generale di partenza, che segue combinando la regola (9.4) con la possibilità di esprimere TA_j in termini delle $A_1, A_2, \ldots$ stesse:

$$U_T^\dagger A_j U_T = T_j(A_1, A_2, \ldots) , \tag{9.9}$$

dove le T_j sono funzioni solitamente piuttosto semplici. Per un'analisi dettagliata, preferiamo rimandare ai vari esempi trattati nei prossimi paragrafi.

9.1.3. Trasformazioni infinitesimali e generatori. In base al teorema di Wigner, una trasformazione infinitesimale di simmetria, classicamente realizzata come trasformazione canonica infinitesimale, consiste nel formalismo della meccanica quantistica in un operatore unitario che differisce "poco" dall'identità (per definizione un operatore antiunitario non può differire "poco" dall'identità). Per una definizione precisa, consideriamo un parametro infinitesimo ϵ ed un operatore autoaggiunto Q e poniamo

$$U = \mathbb{1} - i\epsilon Q . \tag{9.10}$$

Si verifica subito che l'operatore U è unitario al primo ordine in ϵ

$$UU^\dagger = (\mathbb{1} - i\epsilon Q)(\mathbb{1} + i\epsilon Q) = \mathbb{1} + O(\epsilon^2) .$$

Ripetendo molte volte una trasformazione infinitesima si ottiene una trasformazione finita: per ogni $|\psi\rangle$ appartenente al dominio di analiticità di Q si ottiene

$$\lim_{n\to\infty} \left(\mathbb{1} - \frac{i\lambda}{n} Q\right)^n |\psi\rangle = \exp(-i\lambda Q)\,|\psi\rangle .$$

D'altro lato, esiste unico l'operatore unitario $U(\lambda)$ che per λ reale coincide con $\exp(-i\lambda Q)$ sul dominio di analiticità di Q, per cui possiamo porre

$$U(\lambda) = \exp(-i\lambda Q) .$$

Ovviamente, per $\lambda = \epsilon$, questa relazione riproduce al primo ordine la definizione iniziale (9.10). Al variare di λ sui reali, $U(\lambda)$ descrive un **sottogruppo ad un parametro**, continuo in senso forte, di operatori unitari (e quindi di trasformazioni di simmetria), caratterizzato dalla legge di composizione

$$U(\lambda')U(\lambda) = U(\lambda' + \lambda) \ .$$

L'operatore autoaggiunto Q si dice il **generatore** di tale sottogruppo. L'inverso di questa costruzione costituisce il seguente

Teorema di Stone []Sia $\{U(\lambda)\}$ un sottogruppo a un parametro di operatori unitari continuo in senso forte; allora l'operatore Q definito da

$$Q\,|\psi\rangle = \lim_{\lambda\to 0} i\lambda^{-1}\,[U(\lambda) - \mathbb{1}]\,|\psi\rangle$$

su ogni vettore $|\psi\rangle$ per il quale il limite esiste in senso forte, è autoaggiunto e genera il sottogruppo, cioè $U(\lambda) = \exp(-i\lambda Q)$.

Abbiamo già avuto modo di incontrare questo teorema al §7.7, in relazione all'evoluzione temporale ed alla Hamiltoniana, ed al paragrafo §7.6.3, riguardo alle traslazioni spaziali ed al momento. In questo capitolo esso gioca un ruolo fondamentale e sarà d'ora in poi sempre sottinteso.

Supponiamo ora che sia a priori definito, per il sistema $\mathcal{S}$, un sottogruppo continuo ad un parametro $\{T(\lambda), \lambda \in \mathbb{R}\}$ di trasformazioni di simmetria. Risulta allora spontaneo domandarsi se tale sottogruppo è sempre implementabile da operatori unitari della forma $U_{T(\lambda)} \equiv U(\lambda) = \exp(-i\lambda Q)$, che come sappiamo formano a loro volta un sottogruppo ad un parametro. Il teorema di Wigner e la continuità del sottogruppo per $\lambda \to 0$ ci garantiscono l'esistenza di un operatore unitario $V(\lambda)$ che implementa $T(\lambda)$ a meno di un fattore di fase. L'indeterminazione su tale fase esiste indipendentemente per ogni λ, per cui in generale $V(\lambda)$ soddisfa alla legge di composizione del sottogruppo a meno di un fattore di fase, cioè

$$V(\lambda')V(\lambda) = \omega(\lambda',\lambda)V(\lambda' + \lambda) \ , \tag{9.11}$$

dove $|\omega(\lambda',\lambda)| = 1$. Possiamo sempre fissare la fase globale della famiglia $\{V(\lambda)\}$ in modo tale che $V(0) = \mathbb{1}$, per cui

$$\omega(\lambda, 0) = \omega(0,\lambda) = 1 \ .$$

Quindi, differenziando la (9.11) rispetto a λ' in $\lambda' = 0$ si ottiene

$$\frac{dV(\lambda)}{d\lambda} = -i[Q + f(\lambda)]V(\lambda) \ ,$$

dove Q è il generatore di $V(\lambda)$ e $f(\lambda)$ è una funzione reale e continua

$$Q = i\frac{dV(\lambda)}{d\lambda}\Big|_{\lambda} = 0 \ , \quad f(\lambda) = -i\frac{d}{d\mu}\log\,\omega(\mu,\lambda)\Big|_{\mu=0} \ .$$

L'operatore $U(\lambda)$

$$U(\lambda) = V(\lambda)\,\exp\left[i\int_0^\lambda d\mu\, f(\mu)\right]$$

soddisfa allora all'equazione

$$\frac{dU(\lambda)}{d\lambda} = -iQU(\lambda)\,,$$

la quale, insieme alla condizione $U(0) = \mathbb{1}$, implica immediatamente $U(\lambda) = \exp(-i\lambda Q)$. In definitiva, abbiamo appena verificato che il fattore di fase $\omega(\lambda',\lambda)$ è sempre eliminabile mediante un'opportuna ridefinizione delle fasi relative degli operatori unitari che implementano un sottogruppo ad un parametro di trasformazioni di simmetria. Ogni sottogruppo di questo tipo risulta quindi interamente identificato dal proprio generatore, che è un operatore autoaggiunto sullo spazio di Hilbert.

L'azione di una trasformazione infinitesima sugli operatori lineari si deduce dalle relazioni (9.4) e (9.10)

$$(\mathbb{1} + i\epsilon Q)\,X\,(\mathbb{1} - i\epsilon Q) = X + i\epsilon[Q\,,X] + O(\epsilon^2)\,.$$

Alla luce di quanto visto sopra, possiamo riscrivere questa relazione come

$$\boxed{[Q\,,X] = -i\frac{d}{d\lambda}[T(\lambda)X]\Big|_{\lambda=0}}$$

Quindi l'operatore X è invariante sotto $T(\lambda)$ se e solo se esso commuta con il corrispondente generatore Q.

9.1.4. Sistemi composti. Consideriamo due sistemi fisici $\mathcal{S}_1$ e $\mathcal{S}_2$, con i relativi spazi di Hilbert $\mathcal{H}_1$ e $\mathcal{H}_2$. Come sappiamo, al sistema composto $\mathcal{S}_1 \cup \mathcal{S}_2$ è associato il prodotto diretto $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ (vedi §7.2.1). Si supponga inoltre che per $\mathcal{S}_1$ e $\mathcal{S}_2$ siano definite le trasformazioni di simmetria T_1 e T_2, implementate rispettivamente dagli operatori U_1 e U_2.

Tra i vari stati puri di $\mathcal{S}_1 \cup \mathcal{S}_2$, vi sono quelli che corrispondono a stati puri sia di $\mathcal{S}_1$ che di $\mathcal{S}_2$; evidentemente, questi stati sono descritti da vettori della forma $|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle\,|\psi_2\rangle$. Su tali vettori possiamo definire l'azione del *prodotto esterno* $T_{12} = (T_1, T_2)$ delle due trasformazioni, in modo molto naturale, come

$$|T_{12}\Psi\rangle = |T_1\psi_1\rangle\;|T_2\psi_2\rangle = [U_1\,|\psi_1\rangle]\;[U_2\,|\psi_2\rangle]\;. \tag{9.12}$$

In effetti l'arbitrarietà della scelta dei vettori rappresentativi dei vari raggi non causa alcun problema, poiché per ipotesi questi stati puri sono fattorizzati: $\rho = \rho_1 \otimes \rho_2$ ($\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ e $\rho_j = |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$, $j = 1,2$).

Ci poniamo ora il problema di come estendere T_{12} a tutto $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ in modo tale che essa sia una trasformazione di simmetria per il sistema

composto. Per quanto visto finora, e tenendo conto che $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ammette per definizione delle basi ortonormali fattorizzate, la condizione appena richiesta sarà senza dubbio soddisfatta se T_{12} viene estesa linearmente o antilinearmente. È tuttavia facile convincersi che se U_1 e U_2 sono entrambi unitari l'unica estensione consistente è quella lineare, mentre se sono entrambi antiunitari, l'unica consistente è l'estensione antilineare; infine, nessuna delle due estensioni è consistente se uno dei due operatori è unitario e l'altro è antiunitario.

Dalla (9.12) risulta ora evidente che l'operatore U_{12} che implementa T_{12} in $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ è il prodotto tensoriale dei due operatori U_1 e U_2,

$$\mathsf{U}_{12} = \mathsf{U}_1 \otimes \mathsf{U}_2 \,. \tag{9.13}$$

Adottando la convenzione diffusa, già introdotta a pag. 195, di identificare U_1 con $\mathsf{U}_1 \otimes \mathbb{1}$ e U_2 con $\mathbb{1} \otimes \mathsf{U}_2$, la (9.13) si riscrive più semplicemente come $\mathsf{U}_{12} = \mathsf{U}_1 \mathsf{U}_2$. Questo risultato si estende in modo ovvio al caso di un numero qualunque di sistemi e relative trasformazioni.

Come già ripetuto, le trasformazioni di simmetria fisicamente più significative sono quelle che traggono origine da proprietà di simmetria dello spazio-tempo. Supponiamo ora che T_1 e T_2 siano trasformazioni di simmetria di questo tipo. È evidente allora che la definizione appena data di trasformazione composta T_{12} non corrisponde in generale ad una simmetria spazio-temporale, a meno che T_1 e T_2 non rappresentino l'azione sugli stati e sulle osservabili di $\mathcal{S}_1$ e $\mathcal{S}_2$ della stessa trasformazione T. Se questo è effettivamente il caso e se esiste una corrispondenza biunivoca tra le osservabili dei due sistemi, possiamo fare l'identificazione $\mathsf{T}_1 = \mathsf{T}_2 = \mathsf{T}$. Consideriamo ad esempio il caso di due particelle distinguibili, soggette ad una data traslazione: evidentemente $\mathsf{T}_1 = \mathsf{T}_2 = \mathsf{T}$ = traslazione di spostamento $\mathbf{a}$ se effettivamente $\mathsf{T}_1 \mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_1 + \mathbf{a}$ e $\mathsf{T}_2 \mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_2 + \mathbf{a}$ (con le restanti osservabili fondamentali, momenti ed eventuali spin, non modificate). Più in generale T_1 e T_2 possono essere realizzazioni distinte della stessa trasformazione T: si pensi ad esempio ad una rotazione sul sistema composto da due particelle di spin diverso. In ogni caso la trasformazione composta T_{12} è ancora una realizzazione della medesima trasformazione T.

Conviene adattare opportunamente la notazione: con $\mathsf{T}^{(1)}$, $\mathsf{T}^{(2)}$ e $\mathsf{T}^{(12)}$ indichiamo le realizzazioni di T su $\mathcal{S}_1$, $\mathcal{S}_2$ e $\mathcal{S}_1 \cup \mathcal{S}_2$, rispettivamente, e scriviamo gli operatori che le rappresentano su $\mathcal{H}_1$, $\mathcal{H}_2$ e $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ come $\mathsf{U}_{\mathsf{T}}^{(1)}$, $\mathsf{U}_{\mathsf{T}}^{(2)}$ e $\mathsf{U}_{\mathsf{T}}^{(12)}$ (anche i primi due sono intesi come operatori su $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, secondo la solita convenzione). Abbiamo dunque, in accordo con l'Eq. (9.13),

$$\mathsf{U}_{\mathsf{T}}^{(12)} = \mathsf{U}_{\mathsf{T}}^{(1)} \mathsf{U}_{\mathsf{T}}^{(2)} \,, \tag{9.14}$$

che si generalizza immediatamente alle composizioni di un numero generico N di sistemi, ovvero

$$U_T^{(12\ldots N)} = U_T^{(1)} U_T^{(2)} \ldots U_T^{(N)} \tag{9.15}$$

con notazione dal significato evidente. Questa costituisce la regola generale secondo la quale una fissata trasformazione di simmetria viene estesa a sistemi composti. Se la trasformazione T è idempotente, $T^2 = \mathbb{1}$, l'operatore U_T è autoaggiunto e può rappresentare una osservabile (questo è il caso ad esempio della *parità*, che discuteremo in dettaglio più avanti). Allora la regola (9.15) identifica U_T come un **numero quantico moltiplicativo**, poiché i suoi autovalori in un sistema composto si ottengono come prodotto degli autovalori di ciascun sistema componente.

Supponiamo ora che T appartenga al sottogruppo ad un parametro di trasformazioni di simmetria $\{T(\lambda)\}$ rappresentato da $U_{T(\lambda)}^{(1)} = \exp(-i\lambda Q_1)$ su $\mathcal{H}_1$ e da $U_{T(\lambda)}^{(2)} = \exp(-i\lambda Q_2)$ su $\mathcal{H}_2$, rispettivamente. La notazione più corretta sarebbe $Q^{(1)}$ e $Q^{(2)}$ anche per i generatori, per sottolineare il fatto che si tratta di due distinte rappresentazioni del medesimo generatore astratto. Una volta messo in chiaro questo punto, possiamo adottare la notazione più leggera Q_1 e Q_2 (un buon compromesso si ottiene ponendo $Q_1 = Q^{(1)} \otimes \mathbb{1}$ e $Q_2 = \mathbb{1} \otimes Q^{(2)}$, il che precisa esattamente lo spazio di Hilbert su cui i vari operatori agiscono). La rappresentazione del sottogruppo $\{T(\lambda)\}$ per il sistema composto si scriverà, secondo la regola (9.14)

$$U_{T(\lambda)}^{(12)} = U_{T(\lambda)}^{(1)} U_{T(\lambda)}^{(2)} = \exp\left[-i\lambda\left(Q_1 + Q_2\right)\right] ,$$

dato che Q_1 e Q_2 evidentemente commutano. Otteniamo così la regola di composizione dei generatori

$$Q^{(12)} = Q_1 + Q_2 , \tag{9.16}$$

che si generalizza immediatamente alla

$$Q^{(12\ldots N)} = \sum_{j=1}^{N} Q_j \tag{9.17}$$

nel caso di una composizione multipla. Di conseguenza possiamo affermare che le osservabili che rappresentano nei vari sottosistemi il generatore di un sottogruppo ad un parametro di trasformazioni di simmetria sono dei **numeri quantici additivi**. Esempi fondamentali di osservabili di questo tipo sono le componenti del momento lineare e del momento angolare, che rispettivamnte rappresentano, come vedremo, i generatori delle traslazioni e delle rotazioni.

9.2. Invarianze e leggi di conservazione

Siamo finalmente in posizione per descrivere l'altro fondamentale aspetto delle simmetrie in meccanica quantistica, cioè quello che riguarda non già come si manifesta la covarianza della leggi fondamentali, che ora diamo per scontato in base alla nozione di trasformazione di simmetria, ma come si manifestano le proprietà di invarianza della dinamica quantistica di uno specifico sistema fisico. Innanzitutto notiamo che, tra tutte le trasformazioni di simmetria, per ipotesi (il postulato IV) ne esiste una famiglia speciale, e cioè quella che corrisponde all'evoluzione temporale $\mathcal{T}(t, t_0)$, implementata dagli operatori unitari $U(t, t_0)$ (vedi §7.7). L'evoluzione temporale per definizione agisce su tutte le caratteristiche del sistema $\mathcal{S}$ e quindi anche sulle altre trasformazioni di simmetria. Dal punto di vista degli operatori che le implementano, questo corrisponde al passaggio dalla descrizione di Schroedinger a quella di Heisenberg: nella prima una trasformazione T è vista come generata da operazioni su $\mathcal{S}$ e i relativi apparati di misura, ed è quindi implementata da un fissato operatore U_T; nella seconda T è interpretata innanzitutto come corrispondenza tra variabili dinamiche, e quindi tra osservabili nella descrizione di Heisenberg, ed è perciò implementata da

$$U_T(t)_H = U(t, t_0)^\dagger \, U_T \, U(t, t_0) \, .$$

In effetti, volendo estendere la legge di trasformazione delle osservabili fondamentali, Eq. (9.9), alla descrizione di Heisenberg, dovremo far uso di $U_T(t)_H$ e non di U_T:

$$U_T(t)_H^\dagger \, A_j(t)_H \, U_T(t)_H = T_j \, (A_1(t)_H, A_2(t)_H, \ldots) \, . \tag{9.18}$$

Se consideriamo invece di effettuare al tempo t la trasformazione T sulle variabili dinamiche, avremo

$$U_T^\dagger A_j(t)_H \, U_T = \tilde{T}_j \, (A_1(t)_H, A_2(t)_H, \ldots) \, ,$$

con le funzioni $\tilde{T}_j$ generalmente diverse dalle T_j. Detto in altri termini, una generica trasformazione di simmetria T non commuta con l'evoluzione temporale, e quindi evolve anch'essa.

Diremo perciò che una fissata trasformazione di simmetria T è una *invarianza* del moto del sistema fisico $\mathcal{S}$ se essa commuta con l'evoluzione temporale del sistema stesso. Abbiamo visto che per le osservabili fondamentali questo richiede che $\tilde{T}_j = T_j$. Dal punto di vista degli stati, la richiesta di invarianza è che due raggi collegati dall'evoluzione temporale siano trasformati da T in due raggi collegati dalla stessa evoluzione temporale. Alternativamente possiamo dire che raggi corrispondenti sotto T all'istante t_0 saranno ancora corrispondenti sotto T all'istante t, per cui

la corrispondenza sotto T degli stati puri è una caratteristica costante del moto.

In termini degli operatori U_T[3] e $U(t,t_0)$ che implementano rispettivamente T e l'evoluzione temporale sullo spazio di Hilbert, la condizione di invarianza si esprime quindi come segue

$$U_T U(t,t_0) = e^{i\Phi} U(t,t_0) U_T \,, \tag{9.19}$$

dove il fattore di fase è in linea di principio possibile dato che le corrispondenze tra raggi non ne vengono alterate. In ogni caso $\Phi = \Phi(t,t_0)$ deve annullarsi per $t = t_0$; inoltre, per le proprietà di $U(t,t_0)$, deve essere una funzione antisimmetrica, $\Phi(t,t_0) = -\Phi(t_0,t)$ e soddisfare la legge di composizione $\Phi(t,t_0) = \Phi(t,t_1) + \Phi(t_1,t_0)$. Quindi $\Phi(t,t_0) = \varphi(t) - \varphi(t_0)$.

Riletta nella forma $U_T U(t,t_0) U_T^\dagger = e^{i\Phi} U(t,t_0)$ la (9.19) esprime l'invarianza dell'evoluzione temporale sotto T, mentre riletta come

$$U(t,t_0)^\dagger \, U_T \, U(t,t_0) = e^{i\Phi} \, U_T$$

essa esprime l'invarianza di T sotto l'evoluzione temporale. Risulta anche evidente che le trasformazioni di simmetria che sono anche invarianze del moto formano un sottogruppo.

Si noti che il fattore di fase $\Phi(t,t_0) = \varphi(t) - \varphi(t_0)$ puó venir sempre riassorbito in una ridefizione di U_T, a patto di accettare anche implementazioni che dipendono dal tempo della trasformazione T, che invece da t non dipende affatto. Possiamo comunque fare a meno di una simile eventualità ed assumere U_T fissato nel tempo, procedendo nel seguente modo. Differenziamo l'Eq. (9.19) rispetto t e facciamo uso dell'equazione del moto di $U(t,t_0)$ (Eq. (7.80)) per ottenere

$$U_T H(t) U(t,t_0) U_T^\dagger = e^{i\Phi} \, [H(t) - \dot\varphi] \, U(t,t_0) \,,$$

dove $\dot\varphi = d\varphi/dt$ e $H(t)$ è la Hamiltoniana, possibilmente dipendente dal tempo. Quindi utilizzando ancora la (9.19), l'ultima relazione si riscrive

$$U_T H(t) \, U_T^\dagger = H(t) - \dot\varphi \,,$$

la quale implica anche

$$U_T^\dagger H(t) \, U_T = H(t) + \dot\varphi \,.$$

Dunque, se $\dot\varphi \neq 0$, U_T agisce come operatore invertibile di traslazione su $H(t)$, che deve perciò possedere uno spettro illimitato sia superiormente che inferiormente. Ma i sistemi fisicamente accettabili devono avere una

[3] In questo come in quasi tutti i seguenti paragrafi, assumeremo tacitamente che U_T sia unitario. Dopo tutto, l'unica implementazione antiunitaria fisicamente rilevante è quella dell'inversione temporale, che tratteremo in dettaglio solo alla fine del capitolo.

Hamiltoniana $H(t)$ limitata dal di sotto per ogni t, per cui necessariamente $\dot{\varphi} = 0$, ovvero $\varphi(t) =$ costante e $\Phi = 0$. Si noti anche che nel caso di un U_T idempotente ($(U_T)^n = \mathbb{1}$ per un qualche intero $n > 1$), dalla (9.19) si ottiene $e^{in\Phi} = 1$, per cui la continuità con il valore 0 a $t = t_0$ impone $\Phi = 0$ sempre, indipendentemente dallo spettro di $H(t)$.

In definitiva, tenendo conto dell'unicità di $U(t, t_0)$ a partire da $H(t)$, abbiamo ottenuto il seguente risultato:

Teorema 9.2.1 []La trasformazione di simmetria T è una invarianza del moto del sistema fisico $\mathcal{S}$ se e solo se U_T commuta con l'Hamiltoniana $H(t)$ di $\mathcal{S}$:

$$[H(t), U_T] = 0 , \tag{9.20}$$

ovvero se $H(t)$ è *invariante* sotto la trasformazione T: $U_T^\dagger H(t) U_T = H(t)$ [4].

Ne consegue immediatamente che l'equazione di Schroedinger non è solo covariante ma anche invariante sotto la trasformazione T in questione. L'equazione trasformata (9.7) è identica a quella originale. In particolare questo significa che se $|\psi(t)\rangle$ è una soluzione dell'equazione di Schroedinger, allora anche $|\psi'(t)\rangle = U_T |\psi(t)\rangle$ lo è.

Supponiamo ora che U_T appartenga al sottogruppo ad un parametro generato dall'osservabile Q, ovvero $U_T = \exp(-i\lambda Q)$ per un certo valore di λ. La condizione di invarianza (9.20) equivale allora alla relazione

$$\boxed{i\frac{\partial}{\partial\lambda}[T(\lambda)H(t)]\Big|_{\lambda=0} = [H(t), Q] = -i\frac{dQ}{dt} = 0}$$

che dimostra che ad ogni sottogruppo ad un parametro di invarianze è associata una legge di conservazione, espressa dal fatto che il generatore Q è un'osservabile costante del moto, cioè una **carica conservata**.

9.2.1. Trasformazioni dipendenti dal tempo. Nel precedente paragrafo abbiamo definito una trasformazione di simmetria come una invarianza, qualora essa commuti con l'evoluzione temporale. Abbiamo anche assunto che la trasformazione T in questione fosse fissata una volta per tutte, cioè fosse indipendente dal tempo t. Possiamo ora togliere questa limitazione, considerando il caso di una famiglia $\{T(t)\}$ di trasformazioni di simmetria che dipende esplicitamente dal tempo, nel senso che essa corrisponde ad operazioni su $\mathcal{S}$ che variano effettivamente da istante a istante. Si intende che tale dipendenza è continua ed è *fissata a priori*, senza alcun riferimento cioè all'evoluzione temporale effettiva del sistema $\mathcal{S}$. Un esempio importante sarà considerato al §9.3.6.

[4] Questa conclusione richiede una modifica in presenza di invarianza locale di gauge (vedi §9.4).

La condizione di invarianza (9.19) va ora modificata nella

$$U_{T(t)}U(t,t_0) = e^{i\Phi}U(t,t_0)U_{T(t_0)} \ . \tag{9.21}$$

Sfruttando le proprietà di $U(t,t_0)$ è facile verificare che dobbiamo ancora avere $\Phi = \varphi(t) - \varphi(t_0)$, per cui possiamo riassorbire il fattore di fase ponendo $U_{T(t)} = e^{i\varphi(t)}V(t)$. Possiamo inoltre assumere che gli operatori $V(t)$ siano unitari, dato che una famiglia antiunitaria si può sempre ottenere moltiplicando per un fissato operatore antiunitario. Scrivendo la (9.21) nella forma

$$V(t) = U(t,t_0)V(t_0)U(t,t_0)^\dagger \tag{9.22}$$

appare ora evidente che l'operatore evoluto secondo Heisenberg, vale a dire

$$V(t)_H = U(t,t_0)^\dagger V(t)U(t,t_0) \ ,$$

coincide con $V(t_0)$ ed è perciò costante nel tempo. D'altra parte, differenziando l'Eq. (9.22) rispetto a t e tenendo conto che

$$H(t) = i[\partial U(t,t_0)/\partial t] \times U(t,t_0)^\dagger$$

si ricava

$$i\frac{\partial V(t)}{\partial t}V(t)^\dagger + V(t)H(t)V(t)^\dagger = H(t) \ ,$$

che esprime l'invarianza dell'equazione di Schroedinger sotto T (si vedano le relazioni (9.7) e (9.8)).

Se inoltre assumiamo che, per ogni t, $V(t)$ sia un elemento del sottogruppo ad un parametro $\exp[-i\lambda Q(t)]$, possiamo riscrivere la (9.22) interamente in termini dei generatori come

$$[H(t),\, Q(t)] = i\frac{\partial Q(t)}{\partial t} \ . \tag{9.23}$$

Abbiamo così ottenuto, da un lato, la legge trasformazione infinitesima della Hamiltoniana (si ricordi che la dipendenza di $Q(t)$ da t si intende fissata a priori) e, dall'altro lato, la legge di conservazione

$$\frac{d}{dt}Q(t)_H = \frac{\partial}{\partial t}Q(t)_H + i[H(t)_H,\, Q(t)_H] = 0 \tag{9.24}$$

per l'osservabile di Heisenberg

$$Q(t)_H = U(t,t_0)^\dagger Q(t)U(t,t_0) \ .$$

9.3. Gruppi di simmetria e di invarianza

Come sappiamo, l'insieme di tutte le trasformazioni di simmetria della descrizione quantomeccanica di un sistema fisico $\mathcal{S}$ formano un gruppo. Inoltre, quelle particolari trasformazioni collegate ad operazioni fattibili in laboratorio costituscono in generale vari *sottogruppi*, e lo stesso vale per le trasformazioni che sono anche invarianze del moto. Inoltre, come vedremo in seguito, tra le trasformazioni di simmetria fisicamente rilevanti, soltanto l'inversione temporale viene implementata da un operatore antiunitario. Nella discussione che segue possiamo quindi limitarci a considerare i sottogruppi formati dalle altre trasformazioni, cui corrispondono operatori unitari. Infatti, componendo questi ultimi con l'inversione temporale, si ottengono le componenti non connesse all'identità che sono rappresentate da operatori antiunitari: le loro proprietà sono comunque riconducibili ai sottogruppi originali ed alla inversione temporale.

Per meglio descrivere il caso di un generico sottogruppo di trasformazioni unitariamente implementabili conviene adottare la notazione propria dei *gruppi astratti* (vedi App. B.1). Se $\mathfrak{G}$ è un tale gruppo, diremo che una certa collezione $\{T\}$ di trasformazioni di simmetria realizza il gruppo $\mathfrak{G}$ se esiste un isomorfismo tra $\mathfrak{G}$ e $\{T\}$: $g \in \mathfrak{G} \longleftrightarrow T(g) \in \{T\}$. Quindi, tramite il teorema di Wigner, risulta identificata una collezione di operatori unitari sullo spazio di Hilbert che rappresentano il gruppo astratto $\mathfrak{G}$ a meno di un fattore di fase. Quest'ultima precisazione è indispensabile proprio perché il teorema di Wigner lascia indeterminata la fase dell'operatore $U(g) \equiv U_{T(g)}$ corrispondente a ciascuna trasformazione $T(g)$; quindi, per una generica scelta di queste fasi, al prodotto $g_1 g_2$ di due elementi g_1 e g_2 di $\mathfrak{G}$ viene in generale associato un operatore $U(g_1 g_2)$ che differisce per un fattore di fase dal prodotto $U(g_1)U(g_2)$ dei due operatori, cioè

$$U(g_1 g_2) = \omega(g_1, g_2) U(g_1) U(g_2) \tag{9.25}$$

dove $|\omega(g_1, g_2)| = 1$. Queste considerazioni sono evidentemente la generalizzazione diretta al caso di un $\mathfrak{G}$ arbitrario di quanto già visto al §9.1.3 per i sottogruppi ad un parametro. Nella terminologia matematica corrente si dice che la famiglia $\{U(g),\, g \in \mathfrak{G}\}$ forma una rappresentazione unitaria **proiettiva** del gruppo $\mathfrak{G}$ sullo spazio di Hilbert dei vettori di stato. Essa si riduce ad una rappresentazione in senso stretto se e solo se esiste una scelta specifica dei fattori di fase tale che $\omega(g_1, g_2) = 1$ per ogni coppia $g_1,\, g_2 \in \mathfrak{G}$. Come vedremo, diversamente dai sottogruppi ad un parametro, per arbitrari $\mathfrak{G}$ questo non è sempre possibile. Per quanto riguarda il fattore di fase globale di $\{U(g),\, g \in \mathfrak{G}\}$, esso risulta fissato dalla regola che l'elemento neutro di $\mathfrak{G}$, cui corrisponde la trasformazione identica, sia rappresentato dall'operatore identità: $U(e) = \mathbb{1}$.

Un caso molto rilevante è quando il sottogruppo $\mathfrak{G}$ è un **gruppo di Lie** connesso. Le corrispondenti trasformazioni sono quindi tutte generate da trasformazioni infinitesime successive. Consideriamo inoltre un insieme $\{\lambda^1, \lambda^2, \ldots, \lambda^r\}$ di *coordinate normali* (o *parametri canonici*) in un intorno dell'elemento neutro di $\mathfrak{G}$ (vedi App. B.1). Indicheremo allora con $g(\lambda^1, \lambda^2, \ldots, \lambda^r)$ un generico elemento di tale intorno e con $U(\lambda^1, \lambda^2, \ldots, \lambda^r)$ l'operatore corrispondente. Si noti che la continuità stessa del gruppo impone che $U(\lambda^1, \lambda^2, \ldots, \lambda^r)$ sia unitario piuttosto che antiunitario: all'origine dello spazio parametrico corrisponde l'elemento neutro $g(0, \ldots, 0) = e$, per cui $U(0, \ldots, 0) = \mathbb{1}$.

Come sappiamo dal §9.1.3, le fasi relative tra gli operatori $U(g)$ possono essere sempre scelte in modo tale che ciascuno dei sottogruppi ad un parametro, per i quali una sola coordinata normale è diversa da zero, venga rappresentato in senso stretto, senza alcun fattore di fase:

$$U(\ldots, \lambda^j, \ldots)\, U(\ldots, \mu^j, \ldots) = U(\ldots, \lambda^j + \mu^j, \ldots)\ .$$

Dunque a ciascuna coordinata normale corrisponde un sottogruppo ad un parametro di operatori unitari, continuo in senso forte. Per il teorema di Stone possiamo allora porre

$$U(\ldots, \lambda^j, \ldots) = \exp\left(-i\lambda^j Q_j\right)\ ,$$

dove Q_j è l'operatore autoaggiunto che *genera* il sottogruppo a un parametro corrispondente alla coordinata λ^j. Ripetendo l'analisi per ciascuno dei restanti sottogruppi si ottiene l'insieme $Q_1, Q_2, \ldots, Q_r$ dei *generatori* della rappresentazione proiettiva corrispondente alle coordinate normali $\lambda^1, \lambda^2, \ldots, \lambda^r$. Quindi, grazie alla definizione stessa di coordinate normali, per un generico elemento del gruppo $\mathfrak{G}$ avremo

$$U(\lambda^1, \lambda^2, \ldots, \lambda^r) = \exp\Big(-i \sum_{j=1}^{r} \lambda^j Q_j\Big)\ . \tag{9.26}$$

Da questa relazione e dalla regola generale (9.4), si deduce facilmente la forma infinitesima per le trasformazioni delle osservabili: se tutte le λ_j sono di ordine ϵ e $\epsilon \to 0$, abbiamo

$$\begin{aligned} T(g)A &= \Big(\mathbb{1} + i\sum_j \lambda_j Q_j + O(\epsilon^2)\Big) A \Big(\mathbb{1} - i\sum_j \lambda_j Q_j + O(\epsilon^2)\Big) \\ &= A + i\sum_j \lambda_j \left[Q_j, A\right] + O(\epsilon^2)\ , \end{aligned}$$

da cui segue immediatamente

$$\left[Q_j, A\right] = -i\frac{\partial}{\partial \lambda^j} T(g)A\Big|_{\lambda_1 = \ldots = \lambda_r = 0}\ . \tag{9.27}$$

Come vedremo più avanti, questa relazione, una volta applicata ad un insieme di osservabili fondamentali $A_1, A_2, \ldots$, risulta di solito sufficiente per fissare i generatori Q_j come funzioni delle $A_1, A_2, \ldots$, a meno di multipli dell'identità.

Consideriamo ora due arbitrari elementi di $\mathfrak{G}$, $g_1 = g(\lambda^1, \ldots, \lambda^r)$ e $g_2 = g(\mu_1, \ldots, \mu_r)$ ed applichiamo la formula di Baker-Hausdorff nella relazione (9.25)

$$U(g_1)U(g_2) = \exp\Big[-i\sum_j(\lambda^j + \mu^j)Q_j - \tfrac{1}{2}\sum_{jk}\lambda^j\mu^k[Q_j, Q_k] + O(\epsilon^3)\Big],$$

dove abbiamo assunto che i parametri λ^j e μ^j siano tutti di ordine ϵ. D'altra parte abbiamo

$$U(g_1 g_2) = \exp\Big(-i\sum_j \nu^j Q_j\Big),$$

per opportuni valori $\nu^1, \ldots, \nu^r$. Inoltre, tenuto conto che necessariamente $\omega(g, e) = \omega(e, g) = 1$, abbiamo

$$\omega(g_1, g_2) = \exp\Big(i\sum_{jk} d_{jk}\lambda^j\mu^k + O(\epsilon^3)\Big),$$

dove le costanti d_{jk} sono antisimmetriche, $d_{jk} = -d_{kj}$, poiché per ipotesi $\omega(g, g) = 1$. Dalla relazione (9.25) otteniamo perciò

$$\boxed{\big[Q_j, Q_k\big] = i\sum_n c^n_{jk}Q_n + i d_{jk}\mathbb{1}}$$

$$\nu_j = \lambda^j + \mu^j + \frac{1}{2}\sum_n c^j_{kn}\lambda^k\mu^n + O(\epsilon^3),$$

in termini delle **costanti di struttura** c^n_{jk} del gruppo $\mathfrak{G}$ (vedi App. B.1). Dunque la natura proiettiva della rappresentazione si traduce al livello dell'algebra di Lie in una cosiddetta *estensione centrale*, ovvero nella comparsa di c-numeri a destra delle regole di commutazione dei generatori sullo spazio di Hilbert.

Se $\omega(g_1, g_2) = 1$ per ogni coppia g_1, g_2, allora evidentemente $d_{jk} = 0$. Il viceversa vale solo se il gruppo in questione è semplicemente connesso. Nel caso di gruppi di Lie non semplicemente connessi esistono rappresentazioni tali che $d_{jk} = 0$, mentre $\omega(g_1, g_2)$ può assumere un certo numero di valori discreti (questo è proprio il caso del gruppo $SO(3)$ delle rotazioni studiato nel cap. 8). In quanto segue consideriamo $\mathfrak{G}$ semplicemente connesso.

La ridefinizione delle fasi relative degli operatori U_T corrisponde ad aggiungere delle costanti agli operatori Q_j

$$Q_j \to Q_j + u_j \Longrightarrow U(\lambda^1, \ldots, \lambda^r) \to \exp\Big(-i \sum_j u_j \lambda^j\Big) U(\lambda^1, \ldots, \lambda^r)$$

e determina la seguente trasformazione lineare per le costanti d_{jk}

$$d_{jk} \to d_{jk} - \sum_n c^n_{jk} u_n \, .$$

Rappresentazioni proiettive le cui costanti caratteristiche d_{jk} sono legate da tale legge di trasformazione si dicono equivalenti. In particolare, una rappresentazione proiettiva è equivalente ad una rappresentazione vettoriale in senso stretto se e solo se le costanti d_{jk} sono della forma $\sum_n c^n_{jk} u_n$ per opportuni u_j. Si noti comunque che le costanti d_{jk} non sono in generale tutte linearmente indipendenti, a causa dei vincoli imposti dall'identità di Jacobi $[[Q_i, Q_j], Q_k] + [[Q_j, Q_k], Q_i] + [[Q_k, Q_i], Q_j] = 0$, vale a dire

$$\sum_n \big(c^n_{ij} d_{kn} + c^k_{jk} d_{in} + c^k_{ki} d_{jn}\big) = 0 \, . \tag{9.28}$$

Vediamo subito che $d_{jk} = \sum_n c^n_{jk} u_n$ rappresenta una famiglia di soluzioni banali di questo vincolo lineare (sempre per via dell'identità di Jacobi soddisfatta dalle costanti di struttura), come richiesto dal fatto che $d_{jk} = \sum_n c^n_{jk} u_n$ è equivalente a $d_{jk} = 0$. In definitiva, le d_{jk} sono le componenti di un generico vettore in uno spazio lineare reale con dimensione ν pari al numero di soluzioni antisimmetriche, non equivalenti a zero e linearmente indipendenti, dell'equazione lineare (9.28). Evidentemente $0 \le \nu \le \frac{1}{2} r(r-1)$. Nei prossimi paragrafi esamineremo più in dettaglio questo problema nel caso di alcuni fondamentali gruppi di simmetria.

Qualora le trasformazioni di simmetria di un certo sottogruppo $\mathfrak{G}$ siano anche delle invarianze del sistema $\mathcal{S}$, ovvero, $\forall t$,

$$[H(t), U(g)] = 0 \, , \qquad \forall g \in \mathfrak{G} \, , \tag{9.29}$$

diremo che $\mathfrak{G}$ è un *gruppo di invarianza* di $\mathcal{S}$. Se $\mathfrak{G}$ è un gruppo di Lie, allora avremo anche

$$[H(t), Q] = 0 \, , \qquad \forall Q \in \mathfrak{g} \, , \tag{9.30}$$

dove $\mathfrak{g}$ è l'algebra di Lie dei generatori di $\{U(g), g \in \mathfrak{G}\}$. $\mathfrak{g}$ è quindi un'algebra di Lie di costanti del moto (vedi §7.7.1).

I gruppi di simmetria giocano un ruolo fondamentale in meccanica quantistica, senz'altro maggiore che in meccanica classica, data la relazione più stretta esistente tra gruppi e loro rappresentazioni unitarie irriducibili in spazi di Hilbert, rispetto a quella esistente tra gruppi e loro realizzazioni canoniche in spazi delle fasi (è la linearità dello spazio di

Hilbert, ovvero il principio di sovrapposizione lineare, che risulta particolarmente vincolante). La nozione di **rappresentazione irriducibile** è di centrale importanza. Essa permette di strutturare lo spazio di Hilbert come somma diretta (o integrale diretto nel caso di gruppi non compatti) di rappresentazioni irriducibili, semplificando notevolmente il problema della decomposizione spettrale delle osservabili che posseggono definite proprietà di trasformazione rispetto al gruppo in questione (abbiamo già avuto modo di illustrare questa idea, per quanto riguarda il gruppo delle rotazioni, nel cap. 8). Questo è vero in particolare per l'Hamiltoniana, e quindi per la risoluzione dell'equazione di Schroedinger, soprattutto nel caso di gruppi di simmetria che siano anche gruppi di invarianza. Su questi temi abbiamo visto vari esempi nei capitoli precedenti; vediamo ora che si tratta di una tematica caratteristica della meccanica quantistica. È anche importante osservare che l'esistenza di cariche conservate associate alle invarianze della dinamica facilita la determinazione stessa del corretto spazio di Hilbert. In effetti, dal punto di vista puramente operativo, risulta senz'altro più facile preparare un sistema fisico in autostati di costanti del moto, piuttosto che di generiche osservabili che non sono conservate nel tempo (durante la preparazione e tra preparazione ed osservazione finale passa inevitabilmente del tempo). Queste considerazioni hanno un rilievo particolare nella fisica delle particelle elementari.

9.3.1. Traslazioni spaziali. Abbiamo già avuto modo in precedenza di parlare delle *traslazioni spaziali* e di come sono implementate nel formalismo della meccanica quantistica. Presentiamo ora la trattazione generale e riassuntiva, adottando il punto di vista attivo. Consideriamo quindi un sistema costituito da un numero arbitrario N di particelle distinguibili, libere di muoversi in $\mathbb{R}^3$, ovvero di quel sistema fisico $\mathcal{S}$ interamente caratterizzato dalle $9N$ osservabili fondamentali che sono le 3 componenti della posizione $\mathbf{x}_j$, del momento coniugato $\mathbf{p}_j$ e dello spin/isospin $\mathbf{s}_j$ di ciascuna particella, soggette per ipotesi alle regole di commutazione canoniche (vedi §7.8). Le traslazioni in $\mathbb{R}^3$ formano un gruppo di Lie abeliano, connesso e semplicemente connesso, isomorfo a $\mathbb{R}^3$ come spazio lineare; una traslazione è individuata da un vettore $\mathbf{a}$, al quale risulta quindi associato un operatore unitario $U(\mathbf{a})$ su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, identificato a meno di un fattore di fase dalle leggi di trasformazione delle osservabili fondamentali:

$$\boxed{\begin{aligned} U^\dagger(\mathbf{a})\,\mathbf{x}_j\,U(\mathbf{a}) &= \mathbf{x}_j + \mathbf{a} \\ U^\dagger(\mathbf{a})\,\mathbf{p}_j\,U(\mathbf{a}) &= \mathbf{p}_j \\ U^\dagger(\mathbf{a})\,\mathbf{s}_j\,U(\mathbf{a}) &= \mathbf{s}_j \end{aligned}} \tag{9.31}$$

Queste relazioni sono essenzialmente basate sull'analogia con la meccanica classica: la posizione di una particella è per ipotesi ciò che trasla, mentre il momento lineare e lo spin, come momento angolare intrinseco (cioè relativo al centro di massa della particella), o l'isospin, come grado di libertà interno, sono invarianti sotto traslazione. Dal punto di vista strettamente logico-operativo, possiamo considerare queste proprietà sotto traslazione come facenti parte della definizione stessa delle osservabili quantomeccaniche fondamentali di un sistema di N particelle distinguibili. In questo senso la struttura composta di tale sistema gioca un ruolo importante: tra le osservabili di ciascuna particella esiste una naturale corrispondenza che viene rispettata dall'azione (9.31) delle traslazioni.

Combinando le relazioni (9.27) e (9.31), si ottengono le condizioni cui devono soddisfare i tre generatori Q_μ, $\mu = 1,2,3$ di $U(\mathbf{a})$:

$$\left[Q_\mu, (x_j)_\nu\right] = i\delta_{\mu\nu}\,, \quad \left[Q_\mu, (p_j)_\nu\right] = \left[Q_\mu, (s_j)_\nu\right] = 0\,.$$

La soluzione è immediata: le Q_μ sono le componenti cartesiane del vettore

$$\mathbf{Q} = \hbar^{-1}\mathbf{P} + \mathbf{u}\mathbb{1}\,,$$

dove $\mathbf{P}$ è il momento totale del sistema

$$\mathbf{P} = \sum_{j+1}^{N} \mathbf{p}_j$$

e $\mathbf{u}$ è un vettore costante arbitrario. Se tuttavia teniamo conto della natura composta del sistema, vediamo subito che la scelta $\mathbf{u} = 0$ è l'unica consistente con la regola (9.16) e la richiesta che il momento generi le traslazioni di una singola particella. Come vedremo in seguito, la scelta $\mathbf{u} = 0$ è anche l'unica compatibile con le proprietà di trasformazione del generatore $\mathbf{Q}$ relative a gruppi di simmetria che contengono le traslazioni come sottogruppo. In ogni caso, la sua eventuale presenza modifica la rappresentazione $U(\mathbf{a})$ solo per un irrilevante fattore di fase, per cui non c'è reale perdita di generalità nel porre $\mathbf{u} = 0$. Dunque la forma esplicita degli operatori unitari $U(\mathbf{a})$ si scrive

$$\boxed{U(\mathbf{a}) = \exp\{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar\}}$$

e, dato che i generatori commutano

$$[P_\mu, P_\nu] = 0 \tag{9.32}$$

essi soddisfano la legge di composizione

$$U(\mathbf{a})U(\mathbf{b}) = U(\mathbf{a}+\mathbf{b})\,,$$

fornendo una rappresentazione vettoriale in senso stretto del gruppo delle traslazioni.

L'assenza di una struttura proiettiva, evidentemente dovuta alla richiesta che le traslazioni lascino invariati i momenti canonicamente coniugati alle posizioni, può sembrare specifica del sistema $\mathcal{S}$ in questione, visto che la natura abeliana delle traslazioni non impone alcun vincolo su una eventuale estensione centrale della (9.32). Al §9.3.5 vedremo invece che si tratta di una proprietà del tutto generale, una volta che le traslazioni spaziali siano combinate con le rotazioni per formare il *gruppo euclideo* in 3 dimensioni.

Infine l'azione degli operatori di traslazione $U(\mathbf{a})$ sulle funzioni d'onda nella rappresentazione della posizione si calcola facilmente

$$(U(\mathbf{a})\Psi)(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N; t) = \Psi(\mathbf{x}_1 - \mathbf{a}, \ldots, \mathbf{x}_N - \mathbf{a}; t) \, .$$

9.3.2. Traslazioni temporali. Nel formalismo della meccanica quantistica, così come descritto sinora, le traslazioni temporali richiedono una trattazione a parte, poiché il tempo stesso riveste un ruolo particolare. La grandezza t che usiamo per parametrizzare il tempo non è una osservabile come la posizione $\mathbf{x}$ di una particella e non possiamo quindi pensare di effettuare una traslazione $t \to t+\tau$ in senso attivo nello stesso modo della relazione (9.31)[5].

Il significato della sostituzione $t \to t+\tau$ è intrinsecamente passivo: essa collega le coordinate temporali usate da due osservatori i cui orologi non sono sincronizzati, ma potrebbero esserlo portando l'uno avanti o l'altro indietro. Dal punto di vista attivo $t \to t+\tau$ non è una traslazione, ma rappresenta l'evoluzione del sistema $\mathcal{S}$ in esame da t a $t+\tau$ (non possiamo spostare $\mathcal{S}$, ad esempio, nel futuro, dobbiamo aspettare che esso evolva nei suoi stati futuri). Come sappiamo dal §7.7, l'evoluzione da t a $t+\tau$ costituisce per ipotesi (il postulato IV) una trasformazione di simmetria, implementata dall'operatore $U(t+\tau, t)$. D'altra parte è evidente che i concetti di evoluzione e traslazione temporale sono strettamente connessi, per cui l'implementazione unitaria della traslazione $t \to t+\tau$ deve discendere da quella dell'evoluzione, cioè da $U(t+\tau, t)$. Il punto fondamentale è stabilire qual è l'azione della traslazione $t \to t+\tau$ sulle osservabili e/o sugli stati del sistema $\mathcal{S}$, non essendo t stesso una osservabile.

[5] Questa dissimmetria tra spazio e tempo costituisce un serio impedimento per la sintesi dei principi della meccanica quantistica e di quelli della relatività ristretta di Einstein. In effetti tale sintesi è risultata (trionfalmente) possibile nella teoria quantistica dei campi, proprio perché in essa viene abbandonato il concetto della posizione di una specifica particella come osservabile: la coordinata spaziale $\mathbf{x}$ viene riportata sullo stesso piano di quella temporale t, in quanto paramentro per la localizzazione non già di un oggetto materiale definito a priori, ma di fenomeni descrivibili mediante opportune osservabili locali che sono funzioni del c-numero $\mathbf{x}$. Certamente la trattazione approfondita di questi temi esula dagli scopi di questo libro; altri accenni sull'argomento si trovano comunque nel §12.3.

Per definire l'azione sulle osservabili la descrizione appropriata è quella di Heisenberg: se $A(t)_H$ è l'operatore di Heisenberg corrispondente ad un operatore A di Schroedinger fissato nel tempo, alla traslazione $t \to t+\tau$ sarà associata la trasformazione

$$A(t)_H \longrightarrow A'(t)_H = A(t-\tau)_H \ ,$$

come richiesto dal fatto che $A(t)_H$ è una *funzione* di t (la regola è quella scalare, $f'(t') = f(t)$ quando $t \to t'$, propria dell'interpretazione passiva). Denotiamo $U(\tau; t-\tau)_H$ l'operatore che implementa tale trasformazione; abbiamo allora, per ipotesi

$$U(\tau; t-\tau)^\dagger_H A(t)_H \, U(\tau; t-\tau)_H = A(t-\tau)_H \ ,$$

che possiamo anche scrivere

$$U(\tau; t)^\dagger_H A(t+\tau)_H \, U(\tau; t)_H = A(t)_H \tag{9.33}$$

Di conseguenza, in base alla regola di Heisenberg (7.85), $A(t)_H = U(t, t_0)^\dagger A \, U(t, t_0)$, e a meno del solito fattore di fase, dobbiamo avere

$$\begin{aligned} U(\tau; t)_H &= U(t+\tau, t_0)^\dagger U(t, t_0) \\ &= U(t, t_0)^\dagger U(t, t+\tau) U(t, t_0) \\ &= \exp\left[+i \int_t^{t+\tau} dt' \, H(t')_H\right] . \end{aligned}$$

Dunque $U(\tau; t)_H$ è l'operatore di Heisenberg corrispondente non già a $U(t+\tau, t)$, ma al suo inverso $U(t, t+\tau)$, come richiesto dalla natura passiva della traslazione, rispetto a quella attiva dell'evoluzione. Si nota subito che al variare di τ la famiglia $\{U(\tau; t)_H\}$ non forma un sottogruppo vero e proprio a causa della residua dipendenza da t

$$U(\tau_1 + \tau_2; t)_H = U(\tau_1; t+\tau_2)_H \, U(\tau_2; t)_H \ . \tag{9.34}$$

Tuttavia la struttura di questa legge di composizione è quella giusta: ad una traslazione di τ_2 al tempo t segue una traslazione di τ_1 al tempo $t+\tau_2$. Si noti che se avessimo definito l'azione sulle variabili dinamiche nel modo opposto, cioè $A'_H(t)_H = A(t+\tau)_H$, al posto della (9.34) avremmo ottenuto $U(\tau_1+\tau_2; t)_H = U(\tau_2; t)_H U(\tau_1; t+\tau_2)_H$, con un anti-ordinamento dell'azione degli operatori sugli stati rispetto alle trasformazioni.

Adottando una terminologia un po' impropria, potremmo definire la (9.34) una quasi-rappresentazione. Si tenga inoltre presente che nella descrizione di Heisenberg gli stati sono costanti nel tempo, essendo stati definiti a $t = t_0$ una volta per tutte, e quindi non contengono alcuna dipendenza implicita né dal parametro τ della traslazione né dall'istante t in cui essa viene eseguita. Questo è quanto risulta naturale richiedere

allo spazio di Hilbert che sostiene la rappresentazione o quasi-rappresentazione di un gruppo di trasformazioni di simmetria. Nel caso di sistemi conservativi, per i quali $dH/dt = 0$, abbiamo $U(\tau;t)_H = U(t, t+\tau) = \exp(i\tau H)$, che non dipende più da t e costituisce un vero sottogruppo nel parametro di traslazione τ, fornendo così una vera e propria rappresentazione delle traslazioni temporali.

9.3.3. Traslazioni spazio-temporali. Consideriamo ora la relazione esistente in generale tra le traslazioni spaziali e quelle temporali. Come operazioni sullo spazio-tempo esse evidentemente commutano. Come trasformazioni di simmetria sullo spazio di Hilbert esse commutano se e solo se l'Hamiltoniana è invariante per traslazioni spaziali, ovvero $[H(t), \mathbf{P}] = 0$, dove $\mathbf{P}$ è il momento totale del sistema. Questo significa che, ad esempio nel caso del sistema di N particelle, le leggi di trasformazione (9.31) valgono in generale solo per le osservabili fondamentali nella descrizione di Schroedinger, e non per quelle di Heisenberg. Se consideriamo la posizione $\mathbf{x}$ di una particella, abbiamo senz'altro

$$U(\mathbf{a})^\dagger \mathbf{x}\, U(\mathbf{a}) = \mathbf{x} + \mathbf{a}\ ,$$

ma l'analoga relazione per la posizione di Heisenberg $\mathbf{x}(t)_H$ si scriverà in generale (vedi Eq. (9.18))

$$U(\mathbf{a};t)_H^\dagger \mathbf{x}(t)_H\, U(\mathbf{a},t)_H = \mathbf{x}(t)_H + \mathbf{a}\ ,$$

dove evidentemente

$$U(\mathbf{a};t)_H = \exp(-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}(t)_H/\hbar)\ .$$

Quindi l'operatore che implementa una traslazione spazio-temporale con parametri $(\mathbf{a},\tau)$ si scrive

$$U(\tau,\mathbf{a};t)_H = U(\tau;t)_H\, U(\mathbf{a};t)_H = U(\mathbf{a};t+\tau)_H\, U(\tau;t)_H\ .$$

In effetti, la sua azione su una generica osservabile $A = A(\mathbf{x},\mathbf{p},\mathbf{s})$ (per brevità omettiamo gli indici di particella e assumiamo A senza dipendenze esplicite dal tempo) si calcola immediatamente

$$U(\tau,\mathbf{a};t)_H^\dagger A(\mathbf{x},\mathbf{p},\mathbf{s},t+\tau)_H\, U(\tau,\mathbf{a};t)_H = A(\mathbf{x}+\mathbf{a},\mathbf{p},\mathbf{s},t)_H\ ,$$

dove per costruzione $A(\mathbf{x},\mathbf{p},\mathbf{s},t)_H = A(\mathbf{q}(t)_H,\mathbf{p}(t)_H,\mathbf{s}(t)_H)$. Tale azione coincide con quanto richiesto per una traslazione spazio-temporale. Tuttavia la collezione di operatori $U(\mathbf{a},\tau;t)_H$ non fornisce una rappresentazione del *gruppo* delle traslazioni spazio-temporali, sempre a causa dell'esplicita dipendenza da t: tramite le regole (9.33) e (9.34) si calcola

$$U(\tau_1+\tau_2,\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2;t)_H = U(\tau_1,\mathbf{a}_1;t+\tau_2)_H\, U(\tau_2,\mathbf{a}_2;t)_H\ .$$

Se il sistema è conservativo e la sua Hamiltoniana è invariante per traslazioni spaziali, ovvero $dH/dt = d\mathbf{P}_H/dt = 0$, allora $U(\mathbf{a}, \tau; t)_H$ non dipende più da t e coincide con l'operatore di Schroedinger

$$\boxed{U(\tau, \mathbf{a}; t)_H = U(\tau, \mathbf{a}) \equiv \exp[\, i(\tau H - \mathbf{a} \cdot \mathbf{P})/\hbar]}$$

In tal caso lo spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ supporta una rappresentazione del gruppo abeliano delle traslazioni spazio-temporali.

Abbiamo dunque verificato che la descrizione quantomeccanica del sistema di N particelle è propriamente covariante rispetto alle traslazioni nello spazio-tempo, dato che è sempre possibile costruire i corrispondenti operatori unitari. D'altra parte, la stessa descrizione risulta invariante qualora i suddetti operatori forniscano una *rappresentazione* del *gruppo* delle traslazioni spazio-temporali. La classe dei sistemi fisici per i quali questo si verifica è per definizione quella dei sistemi *isolati* o *chiusi*: è un fatto universalmente accettato, al punto di configurarsi come un vero e proprio *principio*, che la precisa localizzazione nello spazio o nel tempo di un sistema fisico isolato $\mathcal{S}$ non ne possa influenzare le fondamentali leggi dinamiche. Quindi l'Hamiltoniana di $\mathcal{S}$ non può dipendere dalla sua specifica posizione spaziale o temporale e deve essere invariante sotto traslazioni. In questo caso, e solo in questo caso, il gruppo abeliano delle traslazioni spazio-temporali è effettivamente rappresentato da un gruppo abeliano di operatori unitari sullo spazio di Hilbert.

Un modo per verificare direttamente la correttezza di questo principio consiste nel confrontare le manifestazioni spazialmente e/o temporalmente separate del medesimo fenomeno fisico. Il problema, dal punto di vista strettamente logico, è di come stabilire che si tratta dello stesso fenomeno fisico se si ammette in partenza di poterne osservare manifestazioni distinte. Come noto, la soluzione sta nel concetto di "costanti universali della natura". L'identità di fenomeni fisici che si verificano in luoghi e tempi diversi consiste nel fatto che le leggi dinamiche che quei fenomeni governano hanno la stessa dipendenza dalle costanti universali. Lo specifico valore di queste ultime non è fissato dalle leggi stesse e potrebbe variare per traslazioni abbastanza grandi (per definizione esso non può cambiare per traslazioni dell'ordine delle dimensioni spazio-temporali caratteristiche dei fenomeni propri del sistema sotto osservazione).

Al momento, i limiti sperimentali sulla variabilità delle costanti universali sono molto stringenti, deponendo a favore dell'invarianza delle fondamentali leggi dinamiche per traslazione, ovvero dell'omogeneità dello spazio-tempo "vuoto" [**Wil84**].

Un modo indiretto di verifica dell'invarianza per traslazioni spaziali consiste nel controllare la precisione delle leggi di conservazione ad esse associate, cioè le leggi di conservazione del momento lineare totale del

sistema isolato $\mathcal{S}$. Analogamente, l'invarianza per traslazioni temporali, ovvero l'indipendenza della Hamiltoniana dal tempo, si traduce nella legge di conservazione dell'energia. Tutte queste leggi di conservazione sono state verificate sperimentalmente, su scale spazio-temporali vastamente diverse e con un altissimo livello di accuratezza, per cui sono oggi universalmente accettate.

9.3.4. Rotazioni. Riassumiamo in questo paragrafo la discussione sulle rotazioni, già ampiamente presentata nel cap. 8 dedicato al momento angolare. Sul generico vettore $\mathbf{x}$ dello spazio fisico $\mathbb{R}^3$, la rotazione R agisce secondo la legge di trasformazione

$$\mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{x}' = R\mathbf{x} \,,$$

dove con $R\mathbf{x}$ si intende il vettore con componenti $R_{\mu\nu}x_\nu$. I numeri $R_{\mu\nu}$ formano una matrice 3×3 che denotiamo con lo stesso simbolo R; la matrice R è ortogonale ($RR^T = 1$) ed ha determinante uguale a 1. Si dimostra quindi che le rotazioni formano un gruppo isomorfo al gruppo di Lie connesso $\mathfrak{G} = SO(3)$ delle matrici ortogonali unimodulari. Nella prassi i due gruppi vengono di fatto identificati.

Consideriamo ancora il sistema $\mathcal{S}$ formato da N particelle distinguibili e denotiamo con $U(R)$ l'operatore unitario che implementa la rotazione R. Le proprietà di trasformazione sotto R delle osservabili di $\mathcal{S}$ sono completamente specificate dall'affermazione che le posizioni $\mathbf{x}_j$, i momenti coniugati $\mathbf{p}_j$ e gli spin $\mathbf{s}_j$ sono dei *vettori sotto* $SO(3)$, mentre le osservabili relative ad eventuali gradi di liberta interni, quali l'isospin, sono *scalari sotto* $SO(3)$. Terne di osservabili (A_1, A_2, A_3) che formano vettori sotto $SO(3)$ si trasformano come il generico vettore di $\mathbb{R}^3$, vale a dire

$$\boxed{U(R)^\dagger A_\mu U(R) = R_{\mu\nu} A_\nu}$$

ovvero

$$U(R)^\dagger \mathbf{A}\, U(R) = R\mathbf{A}$$

nella più compatta notazione vettoriale. Singole osservabili A che sono scalari sotto $SO(3)$ sono invece invarianti

$$U(R)^\dagger A\, U(R) = A \,.$$

Una parametrizzazione canonica di $SO(3)$ si ottiene identificando la terna di coordinate normali $(\lambda^1, \lambda^2, \lambda^3)$ con il vettore $\boldsymbol{\lambda}$ di $\mathbb{R}^3$ il cui modulo $|\boldsymbol{\lambda}|$ è l'angolo θ di rotazione antioraria attorno all'asse individuato dal versore $\mathbf{n} = \boldsymbol{\lambda}/|\boldsymbol{\lambda}|$. L'azione di $R = R(\boldsymbol{\lambda})$ sul generico vettore $\mathbf{x}$ si scrive allora

$$R\mathbf{x} = \mathbf{x}\cos\theta + \mathbf{n} \wedge \mathbf{x}\sin\theta + (1 - \cos\theta)(\mathbf{n} \cdot \mathbf{x})\,\mathbf{n} \,,$$

che si riduce nella forma infinitesima, per $\theta \to 0$

$$R\mathbf{x} = \mathbf{x} + \boldsymbol{\lambda} \wedge \mathbf{x} + O(\theta^2) \ .$$

Quindi, se $\mathbf{Q} = (Q_1, Q_2, Q_3)$ sono i generatori di $\{U(R),\ R \in SO(3)\}$ relativi a questa parametrizzazione, in accordo con la forma generale (9.26) avremo

$$U(R) = \exp(-i\boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{Q}) = \exp(-i\theta\, \mathbf{n} \cdot \mathbf{Q}) \ ,$$

con azione infinitesima sulle osservabili vettoriali definita dalle regole di commutazione (vedi Eq. (9.10))

$$[Q_\mu, A_\nu] = -i \frac{\partial}{\partial \lambda^\mu} R_{\nu\rho}(\boldsymbol{\lambda}) A_\rho \Big|_{\boldsymbol{\lambda}=0} = i\epsilon_{\mu\nu\rho} A_\rho \tag{9.35}$$

D'altro canto, $\mathbf{Q}$ commuta evidentemente con osservabili scalari.

Nel nostro sistema di N particelle le regole di commutazione (9.35) valgono dunque con il vettore $\mathbf{A}$ sostituito da uno qualunque dei vettori $\mathbf{x}_j$, $\mathbf{p}_j$ o $\mathbf{s}_j$. Questo impone l'identificazione

$$\mathbf{Q} = \hbar^{-1}\mathbf{J} + \mathbf{u}\mathbb{1} \ ,$$

dove $\mathbf{J}$ è il momento angolare totale del sistema

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} = \sum_{j=1}^{N} \left(\mathbf{x}_j \wedge \mathbf{p}_j + \mathbf{s}_j \right) \ .$$

Infine, la scelta naturale $\mathbf{u} = 0$ nel caso di una sola particella, $N = 1$, unita all'additività dei generatori, implica $\mathbf{u} = 0$ per ogni N, come per le traslazioni. Perciò

$$\boxed{U(R) = \exp(-i\theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}/\hbar)} \tag{9.36}$$

è l'operatore unitario che rappresenta $R = R(\mathbf{n}, \theta)$, cioè la rotazione antioraria di un angolo θ attorno all'asse $\mathbf{n}$. Come sappiamo dall'analisi dettagliata del cap. 8, la rappresentazione $R \to U(R)$ è una *rappresentazione a due valori* di $SO(3)$: se lo spin totale $\mathbf{S} = \sum_j \mathbf{s}_j$ è *semintero* (ovvero se il sistema contiene un numero dispari di particelle con spin semintero), alla stessa rotazione R corrispondono i due operatori unitari distinti $\pm U(R)$. Lo stesso omomorfismo esiste tra $SO(3)$ ed il suo *ricoprimento universale* $SU(2)$, per cui la relazione (9.36) definisce una rappresentazione in senso stretto di $SU(2)$ (vedi §8.2.4 e §8.2.5 per i dettagli). Ora, poiché $\mathbf{J}$ è esso stesso un vettore sotto $SO(3)$

$$[J_\mu, J_\nu] = i\epsilon_{\mu\nu\rho} J_\rho \ , \tag{9.37}$$

sono nulle tutte le costanti caratteristiche $d_{\mu\nu}$ di una eventuale struttura proiettiva a livello algebrico, per cui la rappresentazione (9.36) di $SU(2)$, che è semplicemente connesso, è strettamente vettoriale:

$$U(u_1)U(u_2) = U(u_1 u_2) \ , \quad \forall u_1, u_2 \in SU(2) \ .$$

Si tratta in realtà di un risultato del tutto generale, dato che il vincolo su $d_{\mu\nu}$ imposto dall'identità di Jacobi, Eq. (9.28), non ammette soluzioni non equivalenti a 0 nel caso dell'algebra di Lie di $SU(2)$. Infatti l'antisimmetria in μ e ν da sola obbliga $d_{\mu\nu}$ ad essere proprio della forma equivalente a 0, e cioè $d_{\mu\nu} = \epsilon_{\mu\nu\rho} u_\rho$.

Osservazione *[]Tenendo conto che la residua struttura proiettiva discreta nelle rappresentazioni a due valori di* $SO(3)$ *è fissata una volta per tutte da quella della* rappresentazione fondamentale $R \to u(R) \in SU(2)$*, possiamo dimenticarci degli eventuali fattori di fase proiettivi anche per* $SO(3)$*. Nel seguito eviteremo quindi di scriverli esplicitamente, pur facendo riferimento a rotazioni di* $SO(3)$ *piuttosto che di* $SU(2)$*.*

Per quanto riguarda la questione dell'invarianza sotto rotazioni delle leggi dinamiche fondamentali, vale lo stesso discorso fatto per le traslazioni. Il *principio di invarianza sotto rotazioni*, o *principio di isotropia* dello spazio "vuoto", richiede che un sistema isolato $\mathcal{S}$ sia governato da una Hamiltoniana invariante, la quale commuta quindi con il momento angolare totale $\mathbf{J}$ del sistema stesso. Una verifica diretta della validità di questo principio è fornita dall'indipendenza dall'orientazione di $\mathcal{S}$ nello spazio delle costanti universali, mentre una verifica indiretta si ottiene dalla conservazione, sperimentalmente osservata, del momento angolare totale di $\mathcal{S}$. Nel mondo dei fenomeni microscopici, che sono quelli tipici della meccanica quantistica, la conservazione di $\mathbf{J}$ si traduce in una impressionante serie di regole sulle transizioni di stato che sono permesse per molecole, atomi e particelle subatomiche in un gamma vastissima di processi elementari.

9.3.5. Il gruppo euclideo. Il gruppo delle traslazioni spaziali e quello delle rotazioni sono a loro volta sottogruppi del gruppo delle rototraslazioni dello spazio $\mathbb{R}^3$ o **gruppo euclideo** $E(3)$. Quest'ultimo è formato dalle seguenti trasformazioni del generico trivettore

$$\mathbf{x} \longrightarrow R\mathbf{x} + \mathbf{a}\,, \tag{9.38}$$

per cui possiamo identificare ogni elemento di $E(3)$ con una coppia ordinata $(R, \mathbf{a})$, costituita da una rotazione R ed una traslazione $\mathbf{a}$. Dalla regola generale (9.38) si deduce allora la seguente legge di composizione per $E(3)$

$$(R_1, \mathbf{a}_1)(R_2, \mathbf{a}_2) = (R_1 R_2, \mathbf{R}_1 \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_1)\,,$$

che definisce il gruppo euclideo come **prodotto semidiretto** delle rotazioni e delle traslazioni spaziali. In particolare abbiamo

$$(R, \mathbf{a}) = (1, \mathbf{a})(R, 0)\,. \tag{9.39}$$

Le rappresentazioni di $E(3)$ sullo spazio di Hilbert di un sistema di N particelle si ottengono ora direttamente da quelle delle rotazioni e traslazioni grazie alla regola (9.39)

$$U(R, \mathbf{a}) = U(\mathbf{a})U(R) = \exp(-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}/\hbar) \exp(-i\theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}/\hbar) ,$$

dove si intende che $R = R(\theta, \mathbf{n})$. La legge di composizione

$$U(R_2, \mathbf{a}_2)U(R_1, \mathbf{a}_1) = U(R_2R_1, \mathbf{a}_2 + R_2\mathbf{a}_1)$$

è soddisfatta grazie al fatto che $\mathbf{P}$ è un operatore che si trasforma come un vettore sotto rotazioni. Questo equivale alle regole di commutazione

$$[J_\mu \; P_\nu] = i\epsilon_{\mu\nu\rho}P_\rho , \tag{9.40}$$

che insieme alle relazioni (9.32) e (9.37) definiscono una rappresentazione dell'algebra di Lie dei generatori di $E(3)$. Si tratta evidentemente di una rappresentazione vettoriale in senso stretto, dato che le costanti d_{jk} caratteristiche della struttura proiettiva sono tutte nulle. Come per le sole rotazioni di $SU(2)$, questo risultato è del tutto generale, dato che si dimostra che se $d_{jk} \neq 0$, esse sono comunque equivalenti a zero e quindi rimuovibili. Per la sottoalgebra corrispondente alle rotazioni valgono ovviamente le considerazioni del paragrafo precedente basate sull'antisimmetria delle eventuali $d_{\mu\nu}$. Per le relazioni (9.40) l'argomento è più complesso, dato che l'estensione centrale

$$[J_\mu , P_\nu] = i\epsilon_{\mu\nu\rho}P_\rho + id_{\mu\nu}\mathbb{1} \tag{9.41}$$

non implica ora immediatamente l'antisimmetria di $d_{\mu\nu}$, non essendo più relative ad una sottoalgebra. Tuttavia non dobbiamo dimenticare i vincoli (9.28): per maggiore chiarezza, conviene ripartire dall'origine stessa di tali vincoli, e cioè le identità di Jacobi. Dunque abbiamo senz'altro

$$[\,[J_\mu , J_\nu] , P_\rho] + [\,[P_\rho , J_\mu] , J_\nu] + [\,[J_\nu , P_\rho] , J_\mu] = 0 ,$$

ovvero, facendo uso delle (9.37) prima e delle (9.41) poi,

$$(\epsilon_{\mu\nu\rho}\epsilon_{\rho\lambda\sigma} + \epsilon_{\lambda\mu\rho}\epsilon_{\rho\nu\sigma} + \epsilon_{\nu\lambda\rho}\epsilon_{\rho\mu\sigma})P_\sigma + \epsilon_{\mu\nu\rho}d_{\rho\lambda} - \epsilon_{\lambda\mu\rho}d_{\nu\rho} - \epsilon_{\nu\lambda\rho}d_{\mu\rho} = 0 .$$

La somma ciclica tra parentesi è nulla, dato che non è altro che l'identità di Jacobi per le costanti di struttura di $SO(3)$; una verifica diretta si ottiene utilizzando l'identità

$$\epsilon_{\mu\nu\rho}\epsilon_{\lambda\sigma\rho} = \delta_{\mu\lambda}\delta_{\nu\sigma} - \delta_{\mu\sigma}\delta_{\nu\lambda} . \tag{9.42}$$

Quindi

$$\epsilon_{\mu\nu\rho}d_{\rho\lambda} = \epsilon_{\lambda\mu\rho}d_{\nu\rho} + \epsilon_{\nu\lambda\rho}d_{\mu\rho} ,$$

vale a dire, moltiplicando per $\epsilon_{\mu\nu\sigma}$, sommando su μ e ν e usando ancora la (9.42)

$$d_{\lambda\sigma} + d_{\sigma\lambda} = d_{\mu\mu}\,\delta_{\lambda\sigma} . \tag{9.43}$$

Infine, sommando su $\lambda = \sigma$ si ottiene

$$2d_{\mu\mu} = 3d_{\mu\mu} \,,$$

ovvero $d_{\mu\mu} = 0$ e quindi, dalla (9.43),

$$d_{\mu\nu} + d_{\nu\mu} = 0 \,,$$

che dimostra l'antisimmetria di $d_{\mu\nu}$ anche per l'estensione centrale (9.41). Allora necessariamente $d_{\mu\nu} = \epsilon_{\mu\nu\rho} u_\rho$, che è equivalente a 0, in quanto eliminabile con la ridefinizione $P_\mu \to P_\mu - u_\mu$.

Consideriamo ora la possibilità che le traslazioni spaziali siano rappresentate in modo proiettivo, vale a dire che compaia una estensione centrale nell'Eq. (9.32)

$$[P_\mu \,, P_\nu] = d'_{\mu\nu} \mathbb{1} \,.$$

Come sappiamo, la natura abeliana delle traslazioni non pone vincoli su $d'_{\mu\nu}$ tramite l'Eq (9.28). Tuttavia, in quanto le traslazioni costituiscono un sottogruppo non invariante di $E(3)$, si ottengono delle identità di Jacobi non banali con $\mathbf{J}$. In particolare abbiamo

$$\begin{aligned} 0 = [\,[P_\mu, P_\nu], J_\rho] &= [\,[J_\rho P_\nu], P_\mu] - [\,[J_\rho P_\mu], P_\nu] \\ &= i\epsilon_{\rho\nu\sigma}[P_\sigma, P_\mu] - i\epsilon_{\rho\mu\sigma}[P_\sigma, P_\nu] \\ &= -\epsilon_{\rho\nu\sigma} d'_{\sigma\mu} + \epsilon_{\rho\mu\sigma} d'_{\sigma\mu} \,. \end{aligned}$$

Quindi, moltiplicando per $\epsilon_{\rho\mu\lambda}$ e sommando su ρ e ν si ottiene

$$0 = -(\delta_{\mu\nu}\delta_{\lambda\sigma} - \delta_{\mu\sigma}\delta_{\nu\lambda}) d'_{\sigma\mu} + 2d'_{\nu\lambda}$$

da cui, tenendo conto che $d'_{\mu\mu} = 0$ per antisimmetria, segue subito che $d_{\nu\lambda} = 0'$. Quindi le traslazioni spaziali non ammettono rappresentazioni proiettive di alcun tipo una volta incluse come sottogruppo di $E(3)$.

9.3.6. Trasformazioni galileiane. Il gruppo euclideo è a sua volta un sottogruppo del gruppo delle trasformazioni galileiane, o **gruppo di Galilei** $G(3,1)$, che costituisce il gruppo di relatività della meccanica newtoniana. Oltre alle rototraslazioni, esso contiene le traslazioni temporali, di cui abbiamo già discusso, e le trasformazioni galileiane *pure* (o *boost galileiani*), che connettono osservatori in moto rettilineo uniforme l'uno rispetto all'altro. Esse agiscono sul generico trivettore come traslazioni dipendenti in modo lineare dal tempo,

$$\mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{x} + \mathbf{v}t \,, \tag{9.44}$$

dove $\mathbf{v}$ è la velocità relativa tra i due osservatori. Indicando con la quadrupla $(R, \mathbf{v}, \mathbf{a}, \tau)$ un generico elemento di $G(3,1)$, abbiamo la legge di trasformazione del punto spazio-temporale

$$(\mathbf{x}, t) \longrightarrow (R\mathbf{x} + \mathbf{v}t + \mathbf{a}, t + \tau) \,,$$

da cui segue la legge di composizione

$$\begin{aligned}&(R_1, \boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{a}_1, \tau_1)(R_2, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{a}_2, \tau_2)\\ &= (R_1R_2, R_1\boldsymbol{v}_2 + \boldsymbol{v}_1, R_1\boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{v}_1\tau_2 + \boldsymbol{a}_1, \tau_1 + \tau_2)\ .\end{aligned}$$

Ci poniamo ora il problema di implementare le trasformazioni galileiane nel caso del sistema $\mathcal{S}$ di N particelle. Consideriamo inizialmente i boost (9.44), che rappresentano un importante esempio di trasformazioni con dipendenza temporale esplicita (vedi §9.2.1). Essi sono evidentemente parametrizzati dal trivettore $\boldsymbol{v}$ ed agiscono anche sul momento di ciascuna particella, $\boldsymbol{p}_j \to \boldsymbol{p}_j + m_j\boldsymbol{v}$ (m_j è la massa della j-esima particella), mentre lasciano invariati gli spin/isospin. Quindi l'operatore unitario $U(\boldsymbol{v}, t)$ che implementa il boost con velocità $\boldsymbol{v}$ deve soddisfare

$$\begin{aligned}U(\boldsymbol{v}, t)^\dagger \boldsymbol{x}_j U(\boldsymbol{v}, t) &= \boldsymbol{x}_j + \boldsymbol{v}t\\ U(\boldsymbol{v}, t)^\dagger \boldsymbol{p}_j U(\boldsymbol{v}, t) &= \boldsymbol{p}_j + m_j\boldsymbol{v}\\ U(\boldsymbol{v}, t)^\dagger \boldsymbol{s}_j U(\boldsymbol{v}, t) &= \boldsymbol{s}_j\ .\end{aligned} \tag{9.45}$$

A meno del solito fattore di fase la soluzione è

$$U(\boldsymbol{v}, t) = \exp[-i\boldsymbol{v}\cdot(t\boldsymbol{P} - M\boldsymbol{X})/\hbar]\ ,$$

dove $M = \sum_j m_j$ è la massa totale del sistema e

$$\boldsymbol{X} = \frac{1}{M}\sum_{j=1}^{N} m_j\boldsymbol{x}_j$$

è la posizione del centro di massa. Dunque il trivettore $\boldsymbol{G}(t) = t\boldsymbol{P} - M\boldsymbol{X}$ è il generatore delle trasformazioni galileiane pure. Si verifica subito che

$$[G_\mu(t)\,, G_\nu(t)] = 0\ ,$$

per cui $U(\boldsymbol{v}, t)U(\boldsymbol{v}', t) = U(\boldsymbol{v} + \boldsymbol{v}', t)$ e la rappresentazione è strettamente vettoriale. È di fondamentale importanza non trascurare la dipendenza esplicita di $U(\boldsymbol{v}, t)$ dal tempo t, né confonderla con l'evoluzione temporale. Per quanto riguarda la sola dipendenza esplicita, abbiamo

$$U(\boldsymbol{v}, t + \tau) = U(\boldsymbol{v}, t)\exp\left(-i\tau\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{P} - i\tfrac{1}{2}Mv^2\tau\right)\ . \tag{9.46}$$

Quindi, passando alla descrizione di Heisenberg,

$$\begin{aligned}U(\boldsymbol{v}; t)_H &= U(t, t_0)^\dagger U(\boldsymbol{v}, t)\, U(t, t_0)\\ &= \exp\left[-i\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{G}(t)_H/\hbar\right]\\ &= \exp\left\{-i\boldsymbol{v}\cdot\left[t\boldsymbol{P}(t)_H - M\boldsymbol{X}(t)_H\right]/\hbar\right\}\ ,\end{aligned}$$

otteniamo la traslazione temporale sotto $t \to t + \tau$

$$\begin{aligned}&U(\tau; t)_H^\dagger U(\boldsymbol{v}; t + \tau)_H\, U(\tau; t)_H\\ &= U(\boldsymbol{v}; t)_H \exp\left(-i\tau\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{P}(t)_H - i\tfrac{1}{2}Mv^2\tau\right)\ .\end{aligned} \tag{9.47}$$

Insieme ai boost, le trasformazioni euclideee formano un sottogruppo, i cui elementi hanno la forma

$$(R, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{a}, 0) = (1, \boldsymbol{v}, 0, 0)(R, 0, \boldsymbol{a}, 0) \ ,$$

corrispondente ad una rototraslazione seguita da un boost. Quindi si può verificare che la trasformazione indotta sulle osservabili fondamentali è implementata dall'operatore

$$U(g, t) = U(\boldsymbol{v}, t) U(R, \boldsymbol{a}) \ ,$$

dove per brevità si è posto $g = (R, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{a}, 0)$. Si tratta però di una rappresentazione proiettiva

$$U(g_1, t) U(g_2, t) = \exp\left(-iM \boldsymbol{a}_1 \cdot R_1 \boldsymbol{v}_2\right) U(g_1 g_2, t) \ , \tag{9.48}$$

in corrispondenza del fatto che i generatori dei boost e delle traslazioni spaziali commutano solo a meno di costanti caratteristiche $d_{\mu\nu}$:

$$[P_\mu, G_\nu] = iM\delta_{\mu\nu} \ .$$

Tratteremo più avanti l'importante questione riguardo alla possibilità o meno di rimuovere questa struttura proiettiva mediante una ridefinizione delle fasi relative degli operatori $U(g, t)$. Tuttavia possiamo fin d'ora dubitare di tale possibilità, dato che le costanti in questione, $d_{\mu\nu} = M\delta_{\mu\nu}$, traggono direttamente origine dalle regole di commutazione canoniche tra posizione e momento.

Per includere anche le traslazioni temporali, dobbiamo passare alla descrizione di Heisenberg. Ponendo ancora $g = (R, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{a}, \tau)$, osserviamo che l'operatore unitario

$$U(g; t)_H = U(\tau; t)_H \, U(\boldsymbol{v}; t)_H \, U(R, \boldsymbol{a}; t)_H \tag{9.49}$$

implementa correttamente g, in quanto soddisfa alla relazione

$$\begin{aligned} &U(g; t)_H^\dagger A(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{s}, t + \tau)_H \, U(g; t)_H \\ &\quad = A(R\boldsymbol{x} + \boldsymbol{v}t + \boldsymbol{a}, R\boldsymbol{p} + m\boldsymbol{v}, R\boldsymbol{s}, t)_H \ , \end{aligned} \tag{9.50}$$

per ogni osservabile $A(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{s})$ (come al §9.3.3 per brevità omettiamo gli indici di particella e assumiamo A senza dipendenze esplicite dal tempo). In questa espressione $\boldsymbol{s}$ rappresenta soltanto lo spin di una generica particella; non è necessario esplicitare eventuali osservabili relative a gradi di libertà interni, dato che esse sono per definizione invarianti sotto movimenti spazio-temporali come le trasformazioni galileiane.

Tenendo conto delle regole (9.47) e (9.34), la legge di composizione si scrive ora

$$U(g_1; t + \tau_2)_H \, U(g_2; t)_H = \omega(g_1, g_2) U(g_1 g_2; t)_H \ , \tag{9.51}$$

dove il fattore di fase vale (cfr. Eq. (9.48))

$$\omega(g_1, g_2) = \exp\left\{-iM\left[\tfrac{1}{2}v_1^2\tau_2 + (\mathbf{a}_1 + \mathbf{v}_1\tau_2)\cdot(R_1\mathbf{v}_2)\right]\right\} . \tag{9.52}$$

Dunque abbiamo verificato che ogni trasformazione galileiana è implementabile unitariamente sullo spazio di Hilbert di N particelle, rispettando perciò il principio di simmetria della relatività galileiana.

PROBLEMA 9.3-2 []Si determini l'azione di $U(g;t)_H$ (vedi Eq. (9.49)) su una generica funzione d'onda $\psi = \psi(\mathbf{x}, t)$ di una particella senza spin. N.B.: per definizione abbiamo $\psi(\mathbf{x}, t) = \langle\mathbf{x}|\psi(t)\rangle = \langle\mathbf{x}|\,U(t, t_0)\,|\psi\rangle$ e $(U(g;t)_H\psi)(\mathbf{x}, t) = \langle\mathbf{x}|\,U(g;t)_H\,|\psi(t)\rangle$.

PROBLEMA 9.3-3 []Si verifichi che, a parte per un inessenziale fattore di fase, un'onda piana $\exp[i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - Et)]$ resta un'onda piana sotto trasformazioni galileiane, con nuovi $\mathbf{p}$ ed E dati da

$$\mathbf{p}' = R\mathbf{p} + M\mathbf{v} . \quad E' = E + R\mathbf{p}\cdot\mathbf{v} + \tfrac{1}{2}Mv^2 .$$

Si tratta evidentemente delle stesse proprietà di trasformazione del momento e dell'energia di una particella classica di massa M.

Tuttavia, il *gruppo* di Galilei $G(3,1)$ non è veramente rappresentato in $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ da $U(g;t)_H$, a causa della sua dipendenza temporale, che varia nella (9.51). Questa dipendenza scompare, se e solo se si applica il **principio di invarianza galileiana**, secondo il quale $G(3,1)$ deve essere un gruppo di invarianza per i sistemi fisici isolati. In tal caso, infatti, tutti i generatori sono costanti nel tempo

$$\mathbf{G}(t)_H = \mathbf{G}(t_0)_H \equiv \mathbf{G} , \qquad \mathbf{P}(t)_H = \mathbf{P}(t_0)_H \equiv \mathbf{P}$$
$$\mathbf{J}(t)_H = \mathbf{J}(t_0)_H \equiv \mathbf{J} , \qquad H(t) = H(t_0) \equiv H$$

e quindi lo stesso deve valere per $U(g;t)_H$, che ora si scrive

$$\boxed{U(g;t)_H = U(g) \equiv e^{i\tau H}e^{-i\mathbf{v}\cdot\mathbf{G}}e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}}e^{-i\theta\,\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}}} \tag{9.53}$$

Si noti che la dipendenza esplicita dal tempo t del generatore dei boost $\mathbf{G}(t) = t\mathbf{P} - M\mathbf{X}$ nella descrizione di Schroedinger, si cancella con l'evoluzione temporale grazie alle equazioni di Heisenberg del moto: infatti una Hamiltoniana per ipotesi invariante sotto trasformazioni galileiane deve soddisfare le regole di commutazione (vedi §9.2.1, Eq. (9.23))

$$[H, \mathbf{G}(t)] = i\frac{\partial\mathbf{G}(t)}{\partial t} = i\mathbf{P}$$

le quali implicano dall'altro lato (vedi Eq. (9.24))

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\mathbf{G}(t)_H &= \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{G}(t)_H + i[H, \mathbf{G}(t)_H] \\ &= e^{iH(t-t_0)}\left\{\mathbf{P} + i[H, \mathbf{G}(t)]\right\}e^{-iH(t-t_0)} = 0 .\end{aligned}$$

Quindi $\mathbf{G}(t)_H = \mathbf{G}(t_0)_H = t_0\mathbf{P} - M\mathbf{X}$ è effettivamente la carica conservata che abbiamo denominato $\mathbf{G}$ (da non confondersi con $\mathbf{G}(t)$, visto che in realtà $\mathbf{G} = e^{iH(t-t_0)}\mathbf{G}(t)e^{-iH(t-t_0)}$). In effetti, siccome per ipotesi $[H, \mathbf{P}] = 0$, la formula precedente si riduce a

$$i[H, \mathbf{X}(t)_H] = \frac{d}{dt}\mathbf{X}(t)_H = \mathbf{P}/M$$

ovvero

$$\mathbf{X}(t)_H = \mathbf{X}(t_0)_H + (t - t_0)\mathbf{P}/M = \mathbf{X} + (t - t_0)\mathbf{P}/M$$

e quindi l'invarianza galileiana implica che la variabile dinamica associata al centro di massa del sistema, cioè $\mathbf{X}(t)_H$, si muove di moto quantomeccanico rettilineo uniforme.

PROBLEMA 9.3-4 []Si verifichi esplicitamente che l'equazione di Schroedinger di una particella libera, vale a dire

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\triangle}{2m}\right]\psi(x, t) = 0$$

è invariante per trasformazioni galileiane $\psi \to U(g)\psi$.

Gli operatori unitari (9.53) forniscono dunque una rappresentazione proiettiva del gruppo di Galileo:

$$U(g_1)U(g_2) = \omega(g_1, g_2)U(g_1g_2) \tag{9.54}$$

dove per definizione

$$g_1 = (R_1, \boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{a}_1, \tau_1)\,, \quad g_2 = (R_2, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{a}_2, \tau_2)\,,$$
$$g_1g_2 = (R_1R_2, R_1\boldsymbol{v}_2 + \boldsymbol{v}_1, R_1\boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{v}_1\tau_2 + \boldsymbol{a}_1, \tau_1 + \tau_2)\,.$$

Questo risultato, insieme alla forma esplicita del fattore di fase $\omega(g_1, g_2)$, Eq. (9.52), può essere determinato direttamente a partire dalla (9.53), mediante ripetute applicazioni della *regola dell'azione aggiunta* (B.12) (cioè $e^A Be^{-A} = B + [A, B] + \ldots$, vedi Eq. (8.2-6) e (B.12)). Si noti che la traslazione spaziale $\boldsymbol{v}_1\tau_2$ indotta da boost e traslazione temporale viene prodotta per $U(g; t)$ dalla dipendenza esplicita dal tempo di $\mathbf{G}(t)$ (vedi Eq. (9.46) e (9.47)), mentre per $U(g)$ essa deriva direttamente dalla regola di commutazione $[H, \mathbf{G}] = i\mathbf{P}$.

Infine si pone la questione della struttura proiettiva della rappresentazione (9.53): si tratta di un esempio in cui tale struttura non è eliminabile, a meno che M non sia nullo, cosa che è fisicamente impossibile. Per convincersene, conviene considerare il problema dal punto di vista dell'algebra di Lie dei generatori H, $\mathbf{P}$, $\mathbf{G}$ e $\mathbf{J}$. L'insieme completo delle relazioni di commutazione è riportato nella Tab. 9-1.

L'unica relazione di commutazione con estensione centrale è la relazione $c)$ tra i generatori dei boost e delle traslazioni spaziali, i quali commutano al livello dell'algebra di Lie astratta. Questa situazione non

a)	$[P_\mu\,,\,P_\nu]=0$	f)	$[J_\mu\,,\,P_\nu]=i\epsilon_{\mu\nu\rho}P_\rho$
b)	$[G_\mu\,,\,G_\nu]=0$	g)	$[J_\mu\,,\,G_\nu]=i\epsilon_{\mu\nu\rho}G_\rho$
c)	$[P_\mu\,,\,G_\nu]=iM\delta_{\mu\nu}$	h)	$[J_\mu\,,\,J_\nu]=i\epsilon_{\mu\nu\rho}J_\rho$
d)	$[H\,,\,P_\mu]=0$	i)	$[H\,,\,G_\mu]=iP_\mu$
e)	$[H\,,\,J_\mu]=0$		

TABELLA 9-1. *Relazioni di commutazione dei generatori delle trasformazioni galileiane.*

è specifica della rappresentazione (9.53), ma è un fatto generale: per il gruppo di Galilei, la dimensione dello spazio delle soluzioni antisimmetriche, non equivalenti a zero e linearmente indipendenti, dell'equazione lineare (9.28) è esattamente uguale a 1, per cui ogni rappresentazione proiettiva è equivalente alla (9.53). In effetti, nel §9.3.5 abbiamo già visto come le relazioni (a), (f) e (h), relative al sottogruppo $E(3)$, non ammettano alcuna estensione centrale non banale. Lo stesso vale evidentemente per le relazioni (b) e (g) che insieme alle (h) definiscono una seconda sottoalgebra di Lie isomorfa alla precedente. Per quanto riguarda le relazioni (b) e (d), che esprimono l'invarianza dell'Hamiltoniana sotto rototraslazioni, dall'identità di Jacobi

$$[\,[J_\mu\,,P_\nu]\,,H]+[\,[H\,,J_\mu]\,,P_\nu,\,]+[\,[P_\nu\,,H]\,,J_\mu]=0\,, \tag{9.55}$$

si ottiene subito $[P_\mu,\,H]=0$, e analogamente si ricava $[J_\mu,\,H]=0$ e $[G_\nu,\,H]=-iP_\nu$, sostituendo P_ν prima con J_ν e poi con G_ν nella (9.55). Infine consideriamo l'identità

$$[\,[J_\mu\,,P_\nu]\,,G_\rho]+[\,[G_\rho\,,J_\mu]\,,P_\nu]+[\,[P_\nu\,,G_\rho]\,,J_\mu]=0\,, \tag{9.56}$$

che si riduce a

$$\epsilon_{\mu\nu\sigma}[P_\sigma\,,G_\rho]=\epsilon_{\mu\rho\sigma}[G_\sigma\,,P_\nu]\,,$$

ovvero, contraendo sugli indici μ e ν con $\epsilon_{\mu\nu\lambda}$,

$$\begin{aligned}2[P_\lambda\,,G_\rho]&=(\delta_{\nu\rho}\delta_{\lambda\sigma}-\delta_{\nu\sigma}\delta_{\lambda\rho})[G_\sigma\,,P_\nu]\\&=[G_\lambda\,,P_\rho]-\delta_{\lambda\rho}[G_\nu\,,P_\nu]\,.\end{aligned}$$

Per $\lambda\neq\rho$ questa relazione implica $[G_\lambda,\,P_\rho]=0$, mentre per $\lambda=\rho$ essa impone solo che $[P_1,\,G_1]=[P_2,\,G_2]=[P_3,\,G_3]$.

Dunque abbiamo verificato che ogni rappresentazione del gruppo di Galilei è riconducile ad una forma in cui i generatori soddisfano alle relazioni di commutazione della Tab. 9-1, in cui compare solo la costante M come caratteristica dell'estensione centrale. In particolare, nel caso della rappresentazione proiettiva sostenuta dallo spazio di Hilbert di N

particelle distinguibili, tale costante va identificata con la massa totale del sistema.

9.3.7. Regola di superselezione di Bargmann. Il ruolo della massa totale M di un sistema fisico isolato $\mathcal{S}$, quale costante caratteristica della struttura proiettiva della corrispondente rappresentazione di $G(3,1)$, è alla base della **regola di superselezione di Bargmann**. Si tratta della regola che impedisce di sovrapporre linearmente vettori di stato appartenenti a rappresentazioni con valori differenti di M. Infatti, si consideri la seguente relazione gruppale di $G(3,1)$:

$$(1,-\boldsymbol{v},-\boldsymbol{a},0)(1,\boldsymbol{v},\boldsymbol{a},0) = (1,0,0,0) = e\,. \tag{9.57}$$

In una data rappresentazione, l'operatore unitario corrispondente al prodotto del membro di sinistra non è l'identità (che rappresenta invece l'elemento neutro al membro di destra), ma il suo multiplo $U = \exp(iM\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{v})\mathbb{1}$. Supponiamo ora che lo spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ sia riducibile rispetto a $G(3,1)$ in sottospazi che sostengono rappresentazioni proiettive con valori differenti di M. Su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ U non agisce più come un multiplo dell'identità, dato che, se $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ appartengono rispettivamente a due rappresentazioni caratterizzate da M_1 e M_2, avremo

$$U(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \exp(iM_1\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{v})\,|\psi_1\rangle + \exp(iM_2\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{v})\,|\psi_2\rangle\ .$$

Quindi osservabili con elementi di matrice nonnulli tra i settori corrispondenti a M_1 e M_2 non sono più invarianti rispetto alla trasformazione identica, il che è evidentemente un assurdo. Ne consegue che tali osservabili non possono esistere, per cui i sottospazi con valori differenti di M sono settori di superselezione. In altre parole, l'assunzione che le osservabili si trasformino secondo il gruppo di Galilei nel passaggio da un sistema di riferimento inerziale all'altro, implica l'esistenza su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ di una regola di superselezione, con la massa inerziale totale come carica di superselezione. Nella realtà, il gruppo di Galilei è solo approssimativamente un gruppo di simmetria, per cui anche la regola di superselezione di Bargmann è solo approssimativamente valida. Nei fenomeni che coinvolgono velocità prossime a quelle della luce, il gruppo di simmetria è quello di Poincaré e la massa inerziale non è più superselezionata né costante del moto.

9.3.8. Particelle elementari. Nel §9.3.6 abbiamo visto come sono implementate le trasformazioni di simmetria galileiane nella descrizione quantomeccanica del sistema $\mathcal{S}$ costituito da N particelle. Evidentemente tale sistema risulta definito a partire dal concetto primario di singola particella o, più precisamente, di singola *particella elementare*, cioè non decomponibile in altre particelle. Inoltre, abbiamo anche visto che nel caso di invarianza galileiana, su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ risulta definita una rappresentazione

proiettiva unitaria del gruppo di Galilei $\mathsf{G}(3,1)$, con associate leggi di conservazione per i dieci generatori della rappresentazione.

Possiamo ora considerare la questione da un punto di vista complementare, secondo il quale il concetto stesso di particella deve essere fondato sul principio di invarianza galileiana[6]. Come sappiamo, questo principio consiste nell'affermazione che lo spazio di Hilbert di un sistema fisico isolato deve sostenere una rappresentazione unitaria di $\mathsf{G}(3,1)$. Tipicamente, tale rappresentazione sarà *riducibile*, e tanto più riducibile quanto più complesso è il sistema fisico $\mathcal{S}$ in questione e quindi più numerose le sue osservabili fondamentali. È infatti naturale attenderci che tutti i gradi di libertà del sistema che non sono direttamente coinvolti nei movimenti spazio-temporali descritti dal gruppo di Galilei corrispondano a sottospazi di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ invarianti rispetto all'azione che il gruppo stesso esercita su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ tramite la sua rappresentazione unitaria.

Risulta allora naturale definire una *particella elementare libera*, secondo la meccanica quantistica nonrelativistica, come un sistema fisico $\mathcal{S}$ il cui spazio di Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ sostiene una *rappresentazione proiettiva unitaria irriducibile* del gruppo di Galilei. Quindi su $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ devono essere per ipotesi definiti 10 operatori autoaggiunti le cui relazioni di commutazione coincidono con quelle della Tab. 9-1, mentre non possono esistere altre osservabili che commutano con essi (a parte multipli dell'identità). La costante M caratteristica dell'unica estensione centrale possibile serve ora a distinguere diverse rappresentazioni e verrà identificata con la massa della particella solo alla fine.

Il concetto di irriducibilità serve dunque a precisare dal punto di vista matematico quello di elementarità, che è invece un concetto di tipo fisico-operativo. Nella pratica è il secondo quello sperimentalmente rilevante, per cui esistono situazioni in cui una particella è elementare sotto certi aspetti e composta sotto altri, in funzione del tipo e della qualità dell'esperimento realmente effettuato. In sostanza, la nozione matematica di riducibilità rispetto al gruppo di Galilei è alla base del modo in cui viene organizzata la struttura della materia nel limite nonrelativistico. Nell'approccio "riduzionista", il primo passo consiste perciò nella classificazione delle particelle elementari, ovvero nella classificazione delle rappresentazioni proiettive unitarie irriducibili del gruppo di Galilei. Si tratta di un problema matematicamente piuttosto complesso, la cui trattazione dettagliata esula dagli scopi di questo libro. Esiste comunque un'abbondante

[6] Si intende che questa impostazione varrà solo per quei fenomeni che coinvolgono velocità trascurabili rispetto alla velocità della luce. In caso contrario dovremo far riscorso al principio più generale basato sulla relatività ristretta di Einstein e sul gruppo Poincaré. Resta comunque valida l'idea che consiste nel fare uso del gruppo dei movimenti spazio-temporali (di Galilei o di Poincaré) per definire in modo preciso il concetto di particella elementare.

letteratura sull'argomento, nella quale si dimostra che le rappresentazioni di interesse fisico sono caratterizzate da due parametri fondamentali: la massa e lo spin della particella. Noi ci limiteremo ad una descrizione molto sommaria della procedura con cui si arriva a ricostruire la particella a partire dai generatori di $G(3,1)$.

Innanzitutto osserviamo che, assumendo $M \neq 0$, gli operatori autoaggiunti

$$\mathbf{L} = \frac{1}{M}\mathbf{P} \wedge \mathbf{G} \quad \text{e} \quad H_0 = \frac{1}{2M}P^2$$

possono sostituire $\mathbf{J}$ e H nella Tab. 9-1 in quanto soddisfano alle stesse relazioni di commutazione. Quindi $\mathbf{S} \equiv \mathbf{J} - \mathbf{L}$ e $H - H_0$ commutano con $\mathbf{G}$, $\mathbf{P}$ e H, ed inoltre

$$[S_\mu, S_\nu] = i\epsilon_{\mu\nu\rho}S_\rho \,. \tag{9.58}$$

In secondo luogo, le relazioni di commutazione (a), (b) e (c) tra $\mathbf{P}$ e $\mathbf{G}$ sono di tipo canonico e quindi, secondo il teorema di Von Neumann, univocamente rappresentabili, a meno di equivalenze unitarie, su $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)$. Se identifichiamo questo $\mathbb{R}^3$ con lo spazio fisico parametrizzato dalla terna $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ su cui sono definite le trasformazioni galileiane, possiamo introdurre l'osservabile posizione X_μ come l'operatore di moltiplicazione per x_μ. Inoltre possiamo identificare, sempre a meno di trasformazioni unitarie, P_μ e G_μ rispettivamente con $-i\partial/\partial x_\mu$ e con $-MX_\mu$. La scelta per $\mathbf{P}$ è dettata dalla richiesta che esso generi le traslazioni di $\mathbf{x}$. La scelta per $\mathbf{G}$ è quella valida per i cosiddetti *boost istantanei*, che connettono sistemi di riferimento inerziali che coincidono a $t = 0$ e sono in moto rettilineo uniforme l'uno rispetto all'altro. In effetti un boost istantaneo lascia invariata la posizione della particella, il che richiede

$$[G_\mu, X_\nu] = 0$$

e quindi necessariamente $\mathbf{G} = -M\mathbf{X}$. Se ora consideriamo una traslazione temporale con parametro τ, vale a dire la trasformazione unitaria definita da $\exp(iH\tau)$, otteniamo $\mathbf{G} = \tau\mathbf{P} - M\mathbf{X}$. Infine, fissando $\tau = t_0$, dove t_0 è l'istante in cui le descrizioni di Schroedinger e di Heisenberg coincidono in un dato sistema di riferimento inerziale, otteniamo la forma $\mathbf{G} = t_0\mathbf{P} - M\mathbf{X}$ che, come sappiamo dal §9.3.6, è il generatore dei boost (una costante del moto!) nella descrizione di Heisenberg.

Dato che $\mathbf{P}$ e $\mathbf{X}$ formano un insieme irriducibile di operatori su $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)$, per il lemma di Schur l'operatore $\mathbf{S}$ che commuta con essi e soddisfa alla (9.58) o è identicamente nullo o agisce su gradi di libertà diversi da $\mathbf{x}$. Le regole di commutazione (9.58) sono quelle delle rotazioni e, come sappiamo dal cap. 8, le rappresentazioni unitarie irriducibili delle rotazioni sono interamente caratterizzate dall'autovalore dell'invariante di Casimir, cioè di S^2. Gli autovalori di S^2 valgono $s(s+1)$, con

$s = 0, 1/2, 1, 3/2, \ldots$ e la rappresentazione con un dato s ha dimensione pari a $2s+1$. Quindi $H_{\mathcal{S}}$ è isomorfo a $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^{2s+1}$ ed s prende il nome di *spin* della particella. Infine $H - H_0$, dovendo commutare con $\mathbf{P}$, $\mathbf{X}$ e $\mathbf{S}$ deve essere un multiplo dell'identità, sempre per il lemma di Schur.

Si noti ora che, assumendo la visione di Heisenberg del moto, possiamo naturalmente definire l'osservabile *velocità* $\dot{\mathbf{X}}$ come $d\mathbf{X}/dt$. D'altronde, dato che per ipotesi H genera le traslazioni temporali, abbiamo (vedi Eq. (9.53))

$$\mathbf{X}(t) = e^{iH(t-t_0)}\mathbf{X}(t_0)\, e^{-iH(t-t_0)}$$

e quindi

$$\dot{\mathbf{X}} = i[H, \mathbf{X}]\,, \tag{9.59}$$

che riletta alla Schroedinger, cioè a tempo fissato, ci fornisce la forma operatoriale di $\dot{\mathbf{X}}$ in termini di quella di $\mathbf{X}$ e quella di H. Ma $H = H_0 + c$-numero per cui

$$\dot{\mathbf{X}} = \frac{\mathbf{P}}{M}\,, \quad H_0 = \tfrac{1}{2}M\dot{X}^2\,,$$

che ci permette di identificare M con la massa della particella e H_0 con l'energia cinetica. Il risultato $H = H_0 + c$-numero rende evidentemente conto della qualifica di *libera* usata per la particella.

9.3.9. Simmetrie interne. Si deve ora osservare che eventuali gradi di libertà "interni" diversi dallo spin devono necessariamente corrispondere ad osservabili che commutano con tutti i generatori di $G(3,1)$, ad eccezione di H. Risulta di fatto più appropriato riservare il nome di *gradi di libertà interni* a questi ultimi: lo spin, trasformandosi sotto rotazioni, non è una vera osservabile interna.

L'esempio più conosciuto di grado di libertà interno è l'**isospin**. Si tratta della variabile dinamica che distingue tra i due stati di un *nucleone*: il protone ed il neutrone. Può sembrare a prima vista arbitrario prendere in considerazione l'esistenza stessa dell'isospin: dopo tutto un protone è un protone ed un neutrone è un neutrone. In realtà, non solo queste due particelle hanno caratteristiche così simili da suggererire un legame più profondo tra di esse, ma esistono processi fisici nei quali un protone si trasforma in neutrone e viceversa (con emissione e/o assorbimento di altre particelle elementari), e l'evidenza sperimentale dimostra che tali processi sono soggetti alle leggi della meccanica quantistica.

Il punto fondamentale è che le differenze tra protone e neutrone sono dovute interamente all'interazione *elettrodebole*. In assenza di quest'ultima essi non sarebbero distinguibili: vi sarebbe una perfetta **simmetria interna** descritta dal gruppo $SU(2)$ dell'isospin. In effetti, senza interazione elettromagnetica, anche il concetto di carica e l'associata regola di

superselezione verrebbero meno. Possiamo quindi considerare la situazione reale come una "rottura" di questa simmetria, dovuta a termini non isospin-invarianti nella Hamiltoniana che descrive i nucleoni.

Non possiamo addentrarci oltre in questa materia (l'isospin non è che l'inizio di una ricchissima struttura interna del mondo subatomico), dato che lo strumento adeguato è la teoria relativistica dei campi quantizzati, che esula dagli scopi di questo libro.

9.3.10. Interazioni minimali. Consideriamo ora il problema di come introdurre le interazioni tra particelle e tra particelle e campi esterni entro lo schema generale basato su $G(3,1)$ come gruppo di simmetria/invarianza. In base alla discussione del precedente paragrafo non prenderemo in considerazione gradi di libertà interni di tipo isospin.

Per definizione il sistema composto da N particelle si ottiene facendo il prodotto diretto, sia come spazio di Hilbert che come osservabili, di N sistemi ciascuno formato da una singola particella elementare libera. In tal caso la regola (9.16) per i generatori di simmetrie nei sistemi composti, se applicata senza correttivi ai generatori di $G(3,1)$, implica che essi sono sempre la somma dei generatori relativi a ciascuna particella. In tal caso diremo che le N particelle sono *libere* e quindi, in particolare, *non interagenti*. Per introdurre una interazione fra le particelle dobbiamo perciò modificare la forma di uno o più generatori, mantenendo inalterate, si intende, le relazioni di commutazione della Tab. 9-1 che assicurano l'invarianza galileiana della dinamica complessiva.

Abbiamo visto in precedenza che $\mathbf{P}$, $\mathbf{J}$ e $\mathbf{G}$ sono la somma dei corrispondenti generatori ad una particella. Quindi soltanto H viene modificata dalla presenza dell'interazione. È facile convincersi che questo rispecchia il modo in cui noi interpretiamo le trasformazioni galileiane: $\mathbf{P}$, $\mathbf{J}$ e $\mathbf{G}$ generano sullo spazio di Hilbert l'effetto di operazioni puramente geometriche, che ammettono sia una visione attiva che una passiva. D'altra parte H genera l'effetto di un'operazione realmente definita solo dal punto di vista passivo, che va interpretata nella visione attiva come evoluzione dinamica nel tempo; quindi H viene *ridefinita* come generatore di tale evoluzione e ne risulta opportunamente modificata.

Si considerino ad esempio due particelle di spin s_1 e s_2. La forma più generale dell'Hamiltoniana compatibile con il principio di invarianza galileiana è data da

$$\begin{aligned} H &= \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(r, S^2) \\ &= \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + V(r, S^2)\,, \end{aligned} \tag{9.60}$$

dove μ è la massa ridotta (vedi §3.4), $V(r, S^2)$ il potenziale di interazione, $r = |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|$ la distanza fra le particelle, $\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$ il momento totale, $\mathbf{p} = (m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2)/M$ il momento relativo e $S^2 = |\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2|^2$ il modulo quadro dello spin totale. Ovviamente $S^2 = s_1(s_1+1) + s_2(s_2+1) + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$, per cui $V(r, S^2)$ può sempre venir riscritto come funzione del prodotto scalare fra i due operatori di spin. Come sappiamo (vedi §8.2.5) l'operatore S^2 possiede $s_1 + s_2 - |s_1 - s_2| + 1$ distinti autovalori, e quindi $V(r, S^2)$ è di fatto equivalente ad una collezione di altrettante funzioni di r soltanto. Si noti comunque che l'invarianza galileiana non pone alcun vincolo sulla forma di V come funzione di r.

La generalizzazione al caso di N particelle è piuttosto ovvia: l'invarianza galileiana fissa la dipendenza di H dalle osservabili "collettive", quali il momento totale $\mathbf{P}$, il momento angolare totale $\mathbf{J}$ e la posizione del centro di massa $\mathbf{X}$. Si ricordi che $\mathbf{X}$ compare nel generatore dei boost $\mathbf{G} = t_0\mathbf{P} - M\mathbf{X}$. È allora abbastanza facile verificare che le relazioni di commutazione della Tab. 9-1 impongono per H la forma generale

$$H = \frac{P^2}{2M} + H_{\text{rel}} ,$$

dove H_{rel} deve commutare con tutti i generatori di $G(3,1)$ e quindi anche con $\mathbf{X}$. L'unica possibilità è che H_{rel} non dipenda affatto da $\mathbf{P}$, $\mathbf{J}$ e $\mathbf{X}$, né da osservabili con proprietà di trasformazione non banali sotto $G(3,1)$. Nel caso in questione possiamo individuare queste osservabili nelle distanze fra le particelle, $|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$, nei quadrati dei momenti relativi $\frac{1}{2}(m_j\mathbf{p}_i - m_i\mathbf{p}_j)/(m_i + m_j)$, nei prodotti scalari fra gli spin $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ ed infine nei gradi di libertà interni di ciascuna particella diversi dallo spin.

L'invarianza galileiana non pone alcun vincolo sulla dipendenza di H_{rel} dalle suddette osservabili, per cui argomenti di diversa natura sono necessari per cercare di limitare le molteplici possibilità[7]. Innanzitutto possiamo fissare la dipendenza di H dai momenti di ciascuna particella, e quindi quella di H_{rel} dai momenti relativi, facendo riferimento al caso di N particelle libere. In tal caso sappiamo che

$$H = H_0 \equiv \sum_{j=1}^{N} \frac{p_j^2}{2m_j} .$$

Quindi, se l'interazione istantanea tra le particelle non dipende dalle velocità relative ma solo dalle posizioni relative e dagli spin, avremo $H = H_0 + V$, dove V non dipende dai momenti. La forma più semplice di V

[7] La situazione è ben diversa nel caso relativistico, vale a dire nella sintesi tra relatività ristretta e meccanica quantistica fornita dalla teoria quantistica dei campi: sotto ipotesi piuttosto generali, solo poche interazioni fra particelle elementari risultano possibili.

contiene soltanto *interazioni a due corpi*, e costituisce la generalizzazione diretta del caso di due particelle, Eq. (9.60):

$$H = H_0 + \sum_{i \leq j} V(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) \ .$$

Benché molto ragionevole, questa scelta non si fonda su alcun principio fondamentale in meccanica quantistica nonrelativistica, e trova la sua legittimazione come teoria efficace che tipicamente emerge nel limite nonrelativistico dell'interazione elettromagnetica tra campi quantizzati.

Consideriamo ora il caso dell'interazione tra una singola particella ed un campo esterno. Tale campo è comunque prodotto da altre particelle "lontane", ma in molti casi è possibile e conveniente ignorare questo fatto assumendo (più o meno a ragione) che il moto della particella sotto esame non determini cambiamenti significativi nelle sorgenti del campo di forze cui essa risponde.

La presenza di un campo esterno come oggetto assoluto, cioè non determinato a sua volta da equazioni dinamiche del moto, inevitabilmente rompe l'invarianza galileiana. Dato che il campo esterno è comunque dovuto all'interazione con altre particelle "lontane", l'unico generatore che richiede modifiche è ancora l'Hamiltoniana, che ora non soddisfa più alle relazioni di commutazione della Tab. 9-1. Tipicamente, un campo esterno non uniforme definisce posizioni e/o direzioni privilegiate nello spazio, per cui dovremo senz'altro abbandonare l'invarianza euclidea, vale a dire le relazioni di commutazione tra H e $\mathbf{P}$ e/o tra H e $\mathbf{J}$ (le (d) e/o (e) della tabella). Inoltre, il campo esterno, e quindi l'Hamiltoniana stessa, possono dipendere esplicitamente dal tempo, per via del moto delle sorgenti del campo, rompendo così anche l'invarianza per traslazioni temporali. Per maggiore chiarezza, consideriamo inizialmente il caso in cui tale invarianza si mantiene, per cui H resta la costante del moto che genera le traslazioni temporali.

L'ultima relazione della Tab. 9-1 che contiene H è la (i), ovvero $[H, G_\mu] = iP_\mu$, ed anche per questa dobbiamo attenderci delle modifiche in presenza di forze esterne. Si ricordi che il momento a destra della relazione rispecchia il fatto che $\mathbf{G}(t) = t\mathbf{P} - M\mathbf{X}$ è il generatore di Schroedinger dei boost. Questi ultimi però, traslando $\mathbf{X}$ di $\boldsymbol{v}t$, non sono più delle invarianze se le forze esterne non sono costanti nello spazio. In altri termini, i boost di Galilei non possono essere delle invarianze insieme alle traslazioni temporali, poiché con esse non formano un sottogruppo di $G(3,1)$, ma combinati assieme danno luogo a traslazioni spaziali. Tuttavia, possiamo ancora far valere una sorta di invarianza residua, vale a dire quella per boost istantanei, a $t = 0$. Dopo tutto, l'invarianza per

traslazioni temporali implica che l'istante $t = 0$ non ha nulla di speciale rispetto agli altri.

Come sappiamo, i boost istantanei sono generati da $\mathbf{G} = -M\mathbf{X}$ e, data la loro interpretazione geometrica, devono traslare l'operatore velocità della particella,

$$\exp(i\boldsymbol{\nu}\cdot\mathbf{G})\,\dot{\mathbf{X}}\,\exp(-i\boldsymbol{\nu}\cdot\mathbf{G}) = \dot{\mathbf{X}} + \boldsymbol{\nu}\,,$$

il che equivale alla richiesta

$$[G_\mu, \dot{X}_\nu] = -i\delta_{\mu\nu}\,.$$

Quindi l'operatore $\mathbf{P} - M\dot{\mathbf{X}}$ commuta con $\mathbf{G}$, ovvero

$$\mathbf{P} - M\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{A}(\mathbf{X}, \mathbf{S})\,, \tag{9.61}$$

con $\mathbf{A}$ arbitraria. La relazione $[H, G_\mu] = iP_\mu$, valida nel caso libero, viene dunque sostituita dalle equazioni di Heisenberg per la posizione, che possiamo scrivere come

$$[H, G_\mu] = iM\dot{X}_\mu = i[P_\mu - A_\mu(\mathbf{X}, \mathbf{S})]\,. \tag{9.62}$$

La forma di H risulta ora parzialmente fissata. Infatti una soluzione immediata della (9.62) è data da $H_0 = |\mathbf{P} - \mathbf{A}(\mathbf{X})|^2/(2M)$, per cui $H - H_0$ deve commutare con $\mathbf{X}$, e quindi

$$H = \frac{1}{2M}|\mathbf{P} - \mathbf{A}(\mathbf{X}, \mathbf{S})|^2 + \phi(\mathbf{X}, \mathbf{S})\,. \tag{9.63}$$

Nel seguito eviteremo di esplicitare la dipendenza da $\mathbf{S}$, sottintendendo che $\mathbf{A}$ e ϕ possono essere matrici non banali nello spazio degli stati di spin. Si noti inoltre che i vari operatori nella relazione (9.63) possono essere intesi sia come operatori di Schroedinger che di Heisenberg, dato che H è comunque una costante del moto. Se $\mathbf{A}$ e/o ϕ non sono costanti nel tempo, la derivazione precedente resta valida riguardando tutti gli operatori coinvolti come operatori di Heisenberg, dato che le relazioni di commutazione utilizzate restano invarianti in forma sotto l'azione dell'operatore di evoluzione $U(t, t_0)$. Quindi le versioni più generali delle (9.61) e (9.63) si scriveranno

$$M\dot{\mathbf{X}}(t) = \mathbf{P}(t) - \mathbf{A}(\mathbf{X}(t), t) \tag{9.64}$$

$$H(t) = \tfrac{1}{2}M|\dot{\mathbf{X}}(t)|^2 + \phi(\mathbf{X}(t), t) \tag{9.65}$$

e restano valide sia nella descrizione di Heisenberg che in quella di Schroedinger, poiché abbiamo, almeno formalmente,

$$U(t, t_0)\,\mathbf{A}(\mathbf{X}(t), t)\,U(t, t_0)^\dagger = \mathbf{A}(U(t, t_0)\mathbf{X}(t)U(t, t_0)^\dagger, t)$$

e analogamente per ϕ.

Il risultato che abbiamo ottenuto è particolarmente significativo nel caso di una particella priva di spin: l'invarianza della dinamica sotto boost

istantanei di Galilei fissa la forma generale di $H = H(\mathbf{A}, \phi)$ in termini di un *potenziale vettore* $A = A(\mathbf{x}, t)$ e di un *potenziale scalare* $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$. Si tratta proprio dell'**accoppiamento minimale** tra una particella carica ed il campo elettromagnetico, discusso al livello classico al §3.3 ed a quello quantistico nel cap. 13, anche se l'identificazione di $\mathbf{A}$ e ϕ con i potenziali elettromagnetici non è obbligatorio, dato che essi sono funzioni arbitrarie che non devono soddisfare le equazioni di Maxwell (si noti che stiamo tacitamente utilizzando unità in cui $e/c = 1, \hbar = 1$).

9.4. Trasformazioni di gauge

Consideriamo ora le trasformazioni di simmetria implementate dagli operatori unitari della forma

$$U_\chi = \exp[-i\chi(\mathbf{X}, t)]$$

dove $\chi(\mathbf{x}, t)$ è un'arbitraria funzione dello spazio-tempo (eventualmente non banale nello spazio dello spin). Esse vengono denominate **trasformazioni di gauge** e lasciano invariata la posizione $\mathbf{X}$, mentre cambiano il momento $\mathbf{P}$:

$$U_\chi^\dagger \mathbf{P}\, U_\chi = \mathbf{P} - \nabla\chi(\mathbf{X}, t)\ .$$

Quindi l'operatore velocità $\dot{\mathbf{X}} = [\mathbf{P} - \mathbf{A}(\mathbf{X}, t)]/M$ si trasforma in modo covariante, nel senso che

$$U_\chi^\dagger \dot{\mathbf{X}}\, U_\chi = \dot{\mathbf{X}}' = [\mathbf{P} - \mathbf{A}'(\mathbf{X}, t)]/M$$

con

$$\mathbf{A}'(\mathbf{x}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) + \nabla\chi(\mathbf{x}, t) \tag{9.66}$$

Di conseguenza l'Hamiltoniana (9.64), tenendo conto della dipendenza esplicita dal tempo di U_χ (vedi al §9.1.2, Eq. (9.8)), si trasforma nel seguente modo gauge-covariante

$$U_\chi^\dagger H(\mathbf{A}, \phi)\, U_\chi = H(\mathbf{A}', \phi')$$

dove

$$\phi'(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t) + \partial_t\chi(\mathbf{x}, t) \tag{9.67}$$

Nel caso in cui $\chi(\mathbf{x}, t)$ sia un multiplo dell'identità nello spazio dello spin, le relazioni (9.66) e (9.67) coincidono con le trasformazioni di gauge proprie dei potenziali elettromagnetici. Quindi, se identifichiamo $\mathbf{A}$ e ϕ con i potenziali elettromagnetici, dobbiamo concludere che soltanto le grandezze gauge-invarianti

$$\mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}\ , \quad \mathbf{E} = \nabla\phi - \partial_t \mathbf{A}\ ,$$

identificabili rispettivamente nel campo magnetico ed nel campo elettrico, sono fisicamente osservabili. Allora la coppia $(\mathbf{A}, \phi)$ e la coppia $(\mathbf{A}', \phi')$

danno luogo alla stessa dinamica per la particella, per cui U_χ implementa non solo una trasformazione di simmetria, ma una vera e propria invarianza.

Viceversa, il *principio di invarianza locale di gauge* [**Pau58**] richiede che la dinamica della particella sia invariante rispetto alle trasformazioni di simmetria implementate da U_χ, per qualunque χ, ed impone perciò che $\mathbf{A}'$ e ϕ' siano fisicamente equivalenti ad $\mathbf{A}$ e ϕ, esattamente come per i potenziali elettromagnetici. Possiamo far risalire questo fondamentale principio alla naturale indeterminazione della fase in meccanica quantistica: infatti, per ricostruire operativamente lo spazio di Hilbert della particella, a partire dallo spettro osservato della posizione, ad ogni punto $\mathbf{x}$ dello spazio fisico viene associato un raggio $|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|$ (si intende, come sempre, nel limite ideale e non normalizzabile di localizzazioni esatte), e non un vettore $|\mathbf{x}\rangle$. Quest'ultimo risulta quindi individuato solo a meno di un fattore di fase, diciamo $\exp[-i\chi(\mathbf{x},t)]$, cui corrisponde evidentemente la trasformazione di simmetria U_χ.

Il principio di invarianza locale di gauge serve a fissare la forma generale della Hamiltoniana (9.64) (il cosiddetto **accoppiamento minimale** fra particella e campo elettromagnetico) in modo complementare all'invarianza per boost galileiani istantanei. Infatti, l'equazione di Schroedinger della particella libera,

$$i\frac{d}{dt}|\psi\rangle = \frac{P^2}{2m}|\psi\rangle \ ,$$

che come sappiamo è univocamente fissata dal principio di invarianza galileiana, nella rappresentazione della posizione ed una volta fissata la rappresentazione per il momento, ad esempio $\mathbf{P} = -i\nabla$, si scrive

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\triangle}{2m}\right]\psi(\mathbf{x},t) = 0 \ .$$

Essa non è invariante di gauge, cambiando forma sotto la ridefinizione della fase da $\psi(\mathbf{x},t)$ a $\exp[i\chi(\mathbf{x},t)]\psi(\mathbf{x},t)$. Per renderla invariante, introduciamo le *derivate covarianti*

$$D_t = \frac{\partial}{\partial t} - i\phi \ , \quad D_j = \frac{\partial}{\partial x_j} - iA_j$$

dove per ipotesi $\mathbf{A}$ e ϕ si trasformano secondo le regole (9.66) e (9.67) *simultaneamente* alla ridefinizione $\psi \to e^{i\chi}\psi$. Allora la nuova equazione ($D^2 \equiv D_jD_j$, con l'usuale convenzione che indici ripetuti sono sommati)

$$\left[iD_t + \frac{D^2}{2m}\right]\psi(\mathbf{x},t) = 0 \tag{9.68}$$

è gauge-invariante. Evidentemente, la (9.68) è la forma nella rappresentazione della posizione dell'equazione di Schroedinger la cui l'Hamiltoniana è $H(\mathbf{A}, \phi)$.

Sulle trasformazioni di gauge torneremo ancora più avanti, in occasione della discussione del moto quantomeccanico di una particella nel campo elettromagnetico (vedi cap. 13). Per il momento concludiamo con la seguente considerazione.

L'equivalenza di potenziali $\mathbf{A}$ e ϕ sotto trasformazioni di gauge comporta la necessità di rivedere, in alcuni casi particolari, il concetto di invarianza della dinamica sotto altre trasformazioni di simmetria. Consideriamo ad esempio il caso in cui $\phi = 0$, mentre $\mathbf{A}$ è una funzione lineare di $\mathbf{x}$ che non dipende dal tempo. Come già anticipato nel §3.3 e come riprenderemo al §13.2, si tratta del contesto necessario per descrivere una particella in un campo magnetico costante. Dunque, per ipotesi abbiamo $A_j(\mathbf{x}) = a_{jk}x_k$, dove le a_{jk} sono costanti arbitrarie. Sfruttando l'equivalenza sotto trasformazioni di gauge, possiamo restringerci al caso in cui $a_{jk} + a_{kj} = 0$, in quanto $(a_{jk} + a_{kj})x_k = \partial_j(a_{ik}x_ix_k)$ è un "puro gauge", cioè è equivalente ad un potenziale nullo attraverso una trasformazione di gauge. Possiamo allora porre $a_{ij} = \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}B_k$, ovvero $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \wedge \mathbf{x}$, dove $\mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}$ è un vettore costante e gauge-invariante. La dinamica sarà quindi invariante per traslazioni spaziali, poiché l'unico oggetto osservabile assoluto, cioè $\mathbf{B}$, è invariante. Tuttavia l'Hamiltoniana (9.63), che ora si scrive

$$H = \frac{1}{2M}|\mathbf{P} - \tfrac{1}{2}\mathbf{B} \wedge \mathbf{X}|^2 ,$$

evidentemente non è invariante per traslazioni, visto che non commuta con gli operatori $U(\mathbf{a}) = \exp(-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{P})$ che le implementano. Abbiamo invece una *invarianza a meno di una trasformazione di gauge*

$$U(\mathbf{a})^\dagger H\, U(\mathbf{a}) = U_\chi^\dagger H\, U_\chi ,$$

dove $\chi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \wedge \mathbf{a} \cdot \mathbf{x}$. Per il principio di invarianza locale di gauge questo basta a garantire anche l'invarianza per traslazioni spaziali.

9.5. Simmetrie spazio-temporali discrete

Sinora abbiamo considerato esempi concreti di trasformazioni di simmetria e invarianza che costituiscono dei sottogruppi continui. Nei prossimi paragrafi tratteremo invece le *simmetrie discrete*, cioè non ottenibili mediante ripetizioni molteplici di trasformazioni infinitesime, che traggono comunque origine dalla struttura (nonrelativistica) dello spazio-tempo.

9.5.1. Inversione spaziale. L'*inversione spaziale*, detta anche trasformazione di **parità** e denotata con $\mathcal{P}$, consiste nella riflessione delle

coordinate attraverso l'origine del sistema di riferimento cartesiano originalmente adottato. Quindi $\mathcal{P}\mathbf{x} = -\mathbf{x}$, per ogni punto $\mathbf{x}$ dello spazio fisico. Evidentemente $\mathcal{P}^2$ coincide con la trasformazione identica, $\mathcal{P}^2 = e$. Inoltre, $\mathcal{P}$ si ottiene (in infiniti modi) componendo una rotazione con una riflessione attraverso un piano. Ad esempio $(x_1, x_2, x_3) \to (-x_1, -x_2, x_3)$ è un rotazione di 180° attorno all'asse $z \equiv x_3$ e $(x_1, x_2, x_3) \to (x_1, x_2, -x_3)$ è una riflessione nel piano xy. Più in generale, possiamo considerare tutte le isometrie dello spazio fisico $\mathbb{R}^3$ che non spostano l'origine ed invertono l'orientazione relativa degli assi coordinati, vale a dire

$$x_\mu \longrightarrow S_{\mu\nu} x_\nu \ , \quad S^T S = S S^T = 1 \ , \quad \det S = -1 \ .$$

Tali trasformazioni formano la componente disconnessa dall'elemento neutro del gruppo $O(3)$ delle matrici ortogonali 3×3. La componente che contiene l'elemento neutro, $SO(3)$, è formata dalle rotazioni trattate precedentemente al §9.3.4.

Quanto appena detto ci permette di dare una suggestiva interpretazione operativa all'inversione spaziale: dato un certo apparato sperimentale $\mathcal{A}$ atto a preparare il sistema $\mathcal{S}$ in un determinato (vettore di) stato $|\psi\rangle$, l'apparato $\mathcal{A}'$ costruito, se possibile, in modo da coincidere con l'immagine di $\mathcal{A}$ ruotata di 180° attorno ad una data direzione e riflessa in uno specchio ortogonale alla direzione stessa, preparerà $\mathcal{S}$ nello stato $|\mathcal{P}\psi\rangle$. Assumendo che $\mathcal{P}$ costituisca una trasformazione di simmetria per il sistema $\mathcal{S}$, per il teorema di Wigner esisterà un operatore unitario o antiunitario $U_\mathcal{P}$, definito a meno di un fattore di fase, tale che $|\mathcal{P}\psi\rangle = U_\mathcal{P} |\psi\rangle$.

Consideriamo come esempio una singola particella elementare priva di spin. In base all'interpretazione operativa di cui sopra, riletta per le osservabili fondamentali $\mathbf{X}$ e $\mathbf{P}$, dobbiamo avere

$$U_\mathcal{P}^\dagger \mathbf{X} U_\mathcal{P} = -\mathbf{X} \ , \quad U_\mathcal{P}^\dagger \mathbf{P} U_\mathcal{P} = -\mathbf{P} \ . \tag{9.69}$$

Applicando questa legge di trasformazione alle regole di commutazione canoniche, si ottiene

$$U_\mathcal{P}^\dagger \, i\delta_{\mu\nu} \, U_\mathcal{P} = U_\mathcal{P}^\dagger [X_\mu \, , P_\nu] U_\mathcal{P} = [-X_\mu \, , -P_\nu] = i\delta_{\mu\nu}$$

il che dimostra che $U_\mathcal{P}$ è unitario. Applicando la stessa legge all'operatore di momento angolare orbitale $\mathbf{L} = \mathbf{X} \wedge \mathbf{P}$, si verifica che $\mathbf{L}$ è invariante per parità. Operatori vettoriali che, come $\mathbf{X}$ e $\mathbf{P}$, cambiano segno sotto inversione spaziale sono detti **vettori polari**. Operatori invarianti come $\mathbf{L}$ sono detti **vettori assiali**.

Supponiamo ora che la particella abbia spin non-nullo, con associato operatore di spin $\mathbf{S}$. La naturale richiesta che il momento angolare totale $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ si trasformi come $\mathbf{L}$ impone che anche $\mathbf{S}$ debba essere invariante,

ovvero

$$U_{\mathcal{P}}^{\dagger} \mathbf{S}\, U_{\mathcal{P}} = \mathbf{S}$$

In particolare, l'elicità della particella $\mathcal{E} = (\mathbf{S}\cdot\mathbf{P})/|\mathbf{P}|$ cambia segno sotto inversione spaziale. Questo fatto, unitamente all'invarianza per rotazioni, caratterizza l'elicità come una grandezza **pseudoscalare** rispetto a $O(3)$. Una grandezza **scalare**, oltre ad essere invariante sotto rotazioni, è invece invariante rispetto all'intero $O(3)$; ad esempio $\mathbf{P}\cdot\mathbf{X}$, P^2 etc.

Queste considerazioni si estendono nel solito modo al caso di N particelle distinguibili, con osservabili fondamentali $\mathbf{x}_j$, $\mathbf{p}_j$ e $\mathbf{s}_j$, $j = 1, 2, \ldots N$. Avremo

$$U_P^{\dagger}\, \mathbf{x}_j\, U_P = -\mathbf{x}_j\,, \quad U_P^{\dagger}\, \mathbf{p}_j\, U_P = -\mathbf{p}_j\,, \quad U_P^{\dagger}\, \mathbf{s}_j\, U_P = \mathbf{s}_j\,. \tag{9.70}$$

Risulta evidente che $U_{\mathcal{P}}^2$ commuta con un insieme irriducibile di operatori e quindi è un multiplo dell'identità, in accordo con il fatto che $\mathcal{P}^2 = e$. Possiamo sempre fissare il fattore di fase lasciato libero dalle (9.70) imponendo che $U_{\mathcal{P}}^2 = \mathbb{1}$. Allora $U_{\mathcal{P}}^{\dagger} = U_{\mathcal{P}}^{-1} = U_{\mathcal{P}}$ e la parità è un'osservabile. Per semplicità d'ora in poi scriveremo $\mathcal{P}$ al posto di $U_{\mathcal{P}}$.

Per ottenere una realizzazione esplicita della parità $\mathcal{P}$ conviene fissare la rappresentazione di $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. Ad esempio, in termini delle funzioni d'onda della posizione di una singola particella priva di spin, le relazioni (9.69) e $\mathcal{P}^2 = \mathbb{1}$ evidentemente richiedono

$$(\mathcal{P}\psi)(\mathbf{x}) = \eta\psi(-\mathbf{x})\,,$$

dove $\eta = \pm 1$ risulta essere un numero quantico vero e proprio, caratteristico della particella in questione, che prende il nome di **parità intrinseca**. Essa non va confusa con la **parità orbitale**, che è invece una proprietà delle funzioni d'onda simmetriche, $\psi(\mathbf{x}) = \psi(-\mathbf{x})$, o antisimmetriche, $\psi(\mathbf{x}) = -\psi(-\mathbf{x})$. Ogni funzione d'onda ψ può comunque essere sempre separata in una parte simmetrica o *pari*, $\frac{1}{2}(1+\eta\mathcal{P})\psi$ e una antisimmetrica o *dispari*, $\frac{1}{2}(1-\eta\mathcal{P})\psi$. L'unitarietà di $\mathcal{P}$ si verifica facilmente, ricordando la forma esplicita del prodotto scalare in $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)$.

Tra le funzioni d'onda con parità definita vanno evidenziate le autofunzioni di L^2 e L_z, vale a dire le funzioni della forma

$$\psi(\mathbf{x}) = u(r)\, Y_{lm}(\vartheta, \varphi)\,, \tag{9.71}$$

dove u è una funzione della sola coordinata radiale $r = |\mathbf{x}|$, ϑ e φ sono come al solito gli angoli sferici e Y_{lm} è l'armonica sferica tale che $L^2 Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm}$ e $L_z Y_{lm} = m Y_{lm}$. Sotto l'inversione $\mathbf{x} \to -\mathbf{x}$, r è invariante mentre $\vartheta \to \pi - \vartheta$ e $\varphi \to \varphi + \pi$. Quindi, dato che $Y_{lm}(\pi-\vartheta, \varphi+\pi) = (-)^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$, la funzione d'onda (9.71) descrive un autostato della parità, cioè, per esteso:

$$\mathcal{P}\,|u, l, m, \eta\rangle = (-1)^l \eta\, |u, l, m, \eta\rangle\,, \tag{9.72}$$

dove

$$|u, l, m, \eta\rangle = \int d^3x\, u(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)\, |\mathbf{x}, \eta\rangle$$

e, per definizione, $\mathcal{P}\,|\mathbf{x}, \eta\rangle = \eta\,|-\mathbf{x}, \eta\rangle$.

PROBLEMA 9.5-5 []Si verifichi che, in base alla relazione (9.72), gli elementi di matrice $\langle u, l, m, \eta|\,\mathbf{V}\,|u', l', m', \eta'\rangle$ si annullano se:
a) $\mathbf{V}$ è polare e $l = l'$, $\eta = \eta'$ oppure $l = l' \pm 1$, $\eta = -\eta'$;
b) $\mathbf{V}$ è assiale e $l = l'$, $\eta = -\eta'$ oppure $l = l' \pm 1$, $\eta = \eta'$.

L'inclusione dello spin non comporta variazioni, dato che $\mathbf{S}$ commuta con $\mathcal{P}$. Altrettanto immediata è l'estensione al caso di più particelle: per costruzione la parità è un numero quantico di tipo moltiplicativo (vedi §7.2.1), per cui avremo

$$(\mathcal{P}\psi)(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N) = \eta_1 \ldots \eta_N \psi(-\mathbf{x}_1, \ldots, -\mathbf{x}_N)\,. \tag{9.73}$$

PROBLEMA 9.5-6 []Si verifichi che, diversamente dal caso di una singola particella, la parità di uno stato di due particelle senza spin, con momento angolare totale $\mathbf{J}$ ben definito, non risulta interamente determinata dall'autovalore di $\mathbf{J}$.

PROBLEMA 9.5-7 [] Il **dipolo elettrico** di un sistema di N particelle con cariche elettriche e_j, $j = 1, \ldots, N$ si scrive $\mathbf{d} = \sum_j e_j \mathbf{x}_j$. Se $|E\rangle$ è uno stato stazionario e $\langle \mathbf{d}\rangle = \langle E|\,\mathbf{d}\,|E\rangle \neq 0$ anche in assenza di campi elettrici esterni, si dice che il sistema possiede un dipolo elettrico *permanente*. Si dimostri che necessariamente $\langle \mathbf{d}\rangle = 0$ se la Hamiltoniana è invariante sotto parità e l'autovalore E è non degenere.

Il ruolo delle parità intrinseche $\eta_1, \ldots, \eta_N$ può a prima vista sembrare inutile: la loro presenza si riduce ad un fattore ± 1 complessivo, apparentemente inosservabile e quindi irrilevante. Dopo tutto, esso rientra nell'ambiguità del fattore di fase lasciato libero dal teorema di Wigner. Il punto è stabilire se la parità intrinseca di una particella rappresenta effettivamente un'osservabile in senso operativo. Se ciascun tipo di particella è conservato, le parità intrinseche non sono in alcun modo osservabili e possiamo dimenticarcene, ponendo ad esempio $\eta = +$ per qualunque tipo di particella. Se invece esistono dei processi fisici dove le particelle non sono conservate, risulta necessario considerare uno spazio di Hilbert in cui possono venir linearmente sovrapposti vettori di stato che descrivono un differente numero N di particelle di ciascun tipo specifico. In tal caso le parità intrinseche non si riducono ad un fattore di fase globale, ma intervengono sulle fasi relative tra le componenti con N diverso di ogni vettore di stato, causando effetti in linea di principio osservabili. Se le particelle in questione sono massive e veramente elementari, i suddetti processi violano il principio di simmetria galileiana, in quanto non rispettano la regola di superselezione di Bargmann. In tal caso dovremmo considerare

processi strettamente relativistici, per i quali il formalismo necessario non è comunque quello della meccanica quantistica nonrelativistica esposto in questo libro. Lo stesso vale per particelle prive di massa come i fotoni, la cui dinamica non rispetta comunque la simmetria galileiana.

D'altra parte, come anche precedentemente accennato, il concetto di particella è abbastanza duttile per accomodare anche in meccanica quantistica nonrelativistica situazioni concrete dove la parità intrinseca gioca un ruolo importante. Si pensi ad esempio a particelle che sono stati legati di altre particelle più fondamentali, ed a processi fisici nei quali queste ultime si ricombinano in nuovi stati legati, preservando tuttavia il loro numero per ciascun tipo. Evidentemente la parità intrinseca di una particella composta è riconducibile alla parità orbitale della funzione d'onda che descrive lo stato relativo dei suoi componenti, ma risulta spesso possibile evitare di descrivere anche la struttura interna delle particelle composte, facendo ricorso a nuovi numeri quantici come le parità intrinseche.

Infatti, supponiamo che due particelle di massa m_1 e m_2 formino uno stato legato descritto dalla funzione d'onda $\phi(\mathbf{x})$, dove $\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ (esempio concreto: elettrone e protone in uno stato definito dell'atomo di idrogeno). Se l'unica forza che agisce su ciascuna particella è quella dovuta all'interazione responsabile dello stato legato, la funzione d'onda complessiva che soddisfa all'equazione di Schroedinger avrà la forma

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{X})\phi(\mathbf{x}) \ ,$$

dove $\mathbf{X} = (m_1 + m_2)^{-1}(m_1\mathbf{x}_1 + m_2\mathbf{x}_2)$ rappresenta, come al solito, il centro di massa. Se ora consideriamo nuove interazioni con altre particelle e/o con campi esterni, tali che risulti trascurabile l'effetto causato sullo stato interno, possiamo assumere per $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ la forma

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \psi(\mathbf{X})\phi(\mathbf{x})$$

Nel caso in cui ϕ abbia parità (orbitale!) definita η, cioè $\phi(-\mathbf{x}) = \eta\phi(\mathbf{x})$, $\eta = \pm 1$, l'azione (9.73) di $\mathcal{P}$ su Ψ si traduce in un'azione su ψ:

$$(\mathcal{P}\psi)(\mathbf{x}) = \eta\,\eta_1\eta_2\psi(\mathbf{x})$$

per cui la particella composta ha $\eta\eta_1\eta_2$ *come parità intrinseca.* Se escludiamo di poter mai osservare una struttura interna anche per le due particelle costituenti, possiamo porre $\eta_1 = \eta_2 = 1$ (ogni altra scelta risulta unitariamente equivalente a questa), per cui la parità orbitale della funzione d'onda interna ϕ si manifesta come parità intrinseca per la funzione d'onda esterna ψ. Si noti che, da questo punto di vista, un processo che determini un cambiamento dello stato interno, con il passaggio da ϕ a ϕ', va visto come un processo in cui il numero di particelle composte di tipo ϕ diminuisce di una unità, mentre aumenta parimenti il numero di

particelle composte di tipo ϕ'. In un processo del genere la parità intrinseca η cambia in η' (assumendo che anche ϕ' abbia parità orbitale definita), con effetti generalmente osservabili.

9.5.2. Violazione della parità. Nei paragrafi precedenti abbiamo ripetutamente enunciato vari principi di simmetria e di invarianza, che vengono infine raccolti in un unico principio che fa riferimento al gruppo di Galilei. Ci poniamo ora il medesimo problema riguardo all'inversione spaziale o parità $\mathcal{P}$.

La questione si può formulare così: l'inversione spaziale è una trasformazione di simmetria universale, cioè valida per ogni sistema fisico? E ammesso che sia così, la dinamica di un sistema isolato è invariante per inversione spaziale? In altri termini, se H è la Hamiltoniana di un tale sistema, possiamo senz'altro assumere che $[H, \mathcal{P}] = 0$, comunque complicata e/o poco precisamente nota sia H? Fino a pochi decenni orsono la risposta affermativa a tutte queste domande era universalmente riconosciuta come quella giusta. Un tale convincimento si basava sull'idea che le leggi fondamentali della natura non potessero distinguere tra "destra" e "sinistra", per cui doveva esistere il processo fisico "riflesso allo specchio" di un qualunque processo osservato. Nel 1956 un esperimento basato sul decadimento β ha messo in crisi questa assunzione, dimostrando che la natura non rispetta la parità[8].

L'esperimento consiste nel misurare la correlazione tra la direzione di polarizzazione di una certa quantità di cobalto ^{60}Co e la direzione di emissione degli elettroni prodotti nel decadimento β di ciascun nucleo da ^{60}Co a ^{60}Ni. Il ^{60}Co possiede uno spin non-nullo e quindi un momento magnetico che, a temperature abbastanza basse, può venir orientato in una data direzione mediante un campo magnetico. Se in un singolo decadimento l'elettrone viene emesso con un momento $\mathbf{p}_e$ che traccia un angolo θ con lo spin $\mathbf{S}$ del nucleo, nello stesso decadimento "visto allo specchio" l'angolo sarà $\pi - \theta$. Quindi, se la parità fosse una trasformazione di simmetria e le leggi fondamentali che regolano il decadimento fossero invarianti per inversione spaziale, come lo sono per rotazione, allora i due processi sarebbero egualmente probabili e la distribuzione degli elettroni sarebbe simmetrica rispetto alla direzione dello spin. Si noti che, essendo la parità un'osservabile, essa apparirebbe in tal caso come una carica (moltiplicativa) conservata. Al contrario, i risultati dell'esperimento con il cobalto, così come di molti altri esperimenti, dimostrano (attualmente

[8] Questa rivoluzionaria scoperta valse il premio Nobel a C.S. Wu, che guidò l'equipe sperimentale, nonché a T.D. Lee e C.N. Yang [**LY56**], che predissero il risultato in base a considerazioni puramente teoriche.

con un errore di una parte su 10^3) che la parità è *massimamente* violata in tutti i fenomeni che coinvolgono la cosiddetta *interazione debole*, responsabile, fra l'altro, del decadimento β del cobalto ^{60}Co.

La descrizione "elementare" di questo tipo di decadimento contempla un neutrone del nucleo che si trasforma in un protone, emettendo un elettrone (raggio β) ed un neutrino. I neutrini sono particelle elementari particolarmente elusive, elettricamente neutre, molto probabilmente prive di massa e con elicità definita; esse giocano un ruolo cruciale nelle interazioni deboli, per la descrizione delle quali il modello teorico attualmente più accredidato (unitamente all'interazione elettromagnetica e a quella *forte*) è il cosiddetto *modello standard*. In esso anche il protone ed il neutrone sono particelle composte da particelle più elementari, i cosiddetti *quarks*, che compaiono nel modello in svariati tipi insieme ai cosiddetti *leptoni* (elettrone, muone, neutrini etc.) ed ai *bosoni vettoriali*, uno dei quali è il fotone della radiazione elettromagnetica. In questa sede non possiamo certo andare oltre nella spiegazione, se non per osservare che nel modello standard non sono contemplati i neutrini con elicità positiva, ma solo quelli con elicità negativa. In una situazione del genere non è nemmeno possibile considerare $\mathcal{P}$ come una trasformazione di simmetria universale.

Dobbiamo infatti ricordare che una trasformazione di simmetria T stabilisce una corrispondenza biunivoca tra stati puri, e quindi presuppone la possibilità reale di preparare $|T\psi\rangle$, per qualunque stato iniziale $|\psi\rangle$ del sistema fisico in questione; a questa stessa possibilità il modello standard fornisce una risposta negativa: tenuto conto che l'elicità cambia segno sotto inversione spaziale, secondo le attuali conoscenze semplicemente non sappiamo come effettivamente realizzare l'apparato sperimentale riflesso $\mathcal{A}'$ atto a preparare dei neutrini con elicità positiva. Stando così le cose, il problema dell'invarianza sotto parità delle interazioni dei neutrini con altre particelle e della conservazione o meno di $\mathcal{P}$ non si pone nemmeno, nel senso che la risposta è necessariamente negativa *a priori*.

D'altra parte possiamo assumere un punto di vista meno restrittivo, in cui non si pretende che lo spazio di Hilbert rilevante, ad esempio per il decadimento β, sia soltanto quello ricostruito a partire dalle osservazioni attuali. In tal caso è lecito contemplare l'esistenza anche di neutrini con elicità positiva, i quali comunque non intervengono mai nelle interazioni a tutt'oggi conosciute[9]. Questa scelta ripristina la simmetria con gli altri leptoni e con i quark, che intervengono nel modello standard con entrambe le elicità. In questo modo anche la parità $\mathcal{P}$ riacquista il ruolo di trasformazione di simmetria: anche se non sempre sappiamo come prepararli,

[9] Per altro, questi stati di elicità positiva sono indispensabili per fornire una massa, comunque piccola, ai neutrini.

stati con elicità opposta esistono per ogni tipo di particella. È ora legittimo porsi la questione se $\mathcal{P}$ è anche una invarianza dell'Hamiltoniana del modello standard. Anche se non più per ragioni di principio, la risposta è comunque negativa: l'evidenza sperimentale impone che $[H, \mathcal{P}] \neq 0$, e la parità non è conservata.

È evidente che, almeno in base alle nostre attuali conoscenze, non abbiamo elementi per prediligere l'uno o l'altro dei due punti di vista appena esposti. Il dato sostanziale è che le leggi fondamentali della natura, così come le conosciamo, violano la parità in tutta una classe di fenomeni. Al contrario, nella classe di fenomeni elementari ancor più vasta caratterizzata dalle sole interazioni forte ed elettromagnetica, l'invarianza per inversione spaziale e la conseguente conservazione della parità sono fuori discussione.

9.5.3. Inversione temporale. Insieme all'inversione spaziale $\mathcal{P}$: $\mathbf{x} \to -\mathbf{x}$, risulta naturale considerare l'*inversione temporale* $\mathcal{T}$: $t \to -t$. In realtà queste due operazioni sulle coordinate spazio-temporali sono concettualmente molto diverse, almeno nel formalismo della meccanica quantistica nonrelativistica di un numero fissato di particelle. La ragione è quella già discussa al §7.7: diversamente dalla posizione, il tempo non è un'osservabile. Piuttosto che di inversione temporale, dovremmo allora parlare di *inversione del moto*, cioè di quella operazione sulle osservabili del sistema $\mathcal{S}$ che trasforma l'evoluzione verso il futuro in quella verso il passato. Per il sistema di N particelle, classicamente questo si ottiene sostituendo alle traiettorie $\mathbf{x}_j(t)$ nuove traiettorie $(\mathcal{T}\mathbf{x})_j(t) = \mathbf{x}_j(-t)$, e quindi rovesciando tutte le velocità per ogni fissata posizione. Si tratta di una trasformazione di simmetria della meccanica classica. Se inoltre le nuove traiettorie sono ancora soluzioni del moto, allora diremo che la dinamica è invariante per inversione temporale.

Queste considerazioni classiche suggeriscono di identificare $\mathcal{T}$, anche nella descrizione quantomeccanica di N particelle senza spin, con l'operazione $\mathbf{x}_j \to \mathbf{x}_j$, $\mathbf{p}_j \to -\mathbf{p}_j$. Assumendo che si tratti effettivamente di una trasformazione di simmetria e denotando come al solito con $U_{\mathcal{T}}$ l'operatore (unitario o antiunitario) che la implementa, per una singola particella avremo

$$U_{\mathcal{T}}^{\dagger} \mathbf{X}\, U_{\mathcal{T}} = \mathbf{P}\,, \quad U_{\mathcal{T}}^{\dagger} \mathbf{P}\, U_{\mathcal{T}} = -\mathbf{P}\,. \tag{9.74}$$

Inoltre, osservando che il momento angolare orbitale $\mathbf{X} \wedge \mathbf{P}$ cambia segno, in presenza di spin non-nullo la definizione di $U_{\mathcal{T}}$ viene completata da

$$U_{\mathcal{T}}^{\dagger} \mathbf{S}\, U_{\mathcal{T}} = -\mathbf{S}\,. \tag{9.75}$$

Applicando la legge di trasformazione (9.74) alle regole di commutazione canoniche, si ottiene

$$U_{\mathcal{T}}^{\dagger}\, i\delta_{\mu\nu}\, U_{\mathcal{T}} = U_{\mathcal{T}}^{\dagger}\,[X_\mu, P_\nu]\, U_{\mathcal{T}} = [X_\mu, -P_\nu] = -i\delta_{\mu\nu}\ ,$$

il che dimostra che $U_{\mathcal{T}}$ deve essere antiunitario (vedi §9.1). L'estensione al caso di N particelle si ottiene nel solito modo, secondo le regole dei sistemi composti.

La covarianza dell'equazione di Schroedinger sotto inversione temporale è garantita proprio dalla natura antiunitaria di $U_{\mathcal{T}}$. Infatti, se

$$i\frac{d}{dt}\,|\psi(t)\rangle = H(t)\,|\psi(t)\rangle\ , \tag{9.76}$$

allora

$$U_{\mathcal{T}}\, i\frac{d}{dt}\,|\psi(t)\rangle = -i\frac{d}{dt}U_{\mathcal{T}}\,|\psi(t)\rangle$$

da un lato, mentre come al solito

$$U_{\mathcal{T}}H(t)\,|\psi(t)\rangle = U_{\mathcal{T}}H(t)U_{\mathcal{T}}^{\dagger}U_{\mathcal{T}}\,|\psi(t)\rangle$$

dall'altro; quindi ponendo

$$|(\mathcal{T}\psi)(t)\rangle = U_{\mathcal{T}}\,|\psi(-t)\rangle\ ,\quad (\mathcal{T}^{-1}H)(t) = U_{\mathcal{T}}H(-t)U_{\mathcal{T}}^{\dagger}\ , \tag{9.77}$$

si ottiene

$$i\frac{d}{dt}\,|\mathcal{T}\psi\rangle = (\mathcal{T}^{-1}H)\,|\mathcal{T}\psi\rangle$$

come richiesto.

In particolare, se $\mathcal{T}H = H$, la dinamica si dice invariante per inversione temporale. Diversamente dalla parità, ad una tale invarianza discreta non è associata alcuna legge di conservazione (vedi al prossimo paragrafo). Come per la parità, l'invarianza sotto $\mathcal{T}$ stabilisce una corrispondenza discreta tra soluzioni del moto: se $|\psi(t)\rangle$ è una soluzione dell'equazione di Schroedinger (9.76), allora anche $U_{\mathcal{T}}\,|\psi(-t)\rangle$ lo è.

Ci poniamo ora il problema di costruire una realizzazione esplicita dell'operatore $U_{\mathcal{T}}$ in una data rappresentazione dello spazio di Hilbert. Ci limiteremo al caso di una singola particella, dato che il caso più generale di N particelle si ottiene tramite il prodotto diretto (vedi §7.2.1).

Nella rappresentazione della posizione, per una particella senza spin, possiamo identificare $U_{\mathcal{T}}$, sempre a meno del solito fattore di fase, con l'operatore K di coniugazione complessa:

$$K\,|\psi\rangle = K\int d^3x\ |\mathbf{x}\rangle\,\langle\mathbf{x}|\psi\rangle = \int d^3x\ |\mathbf{x}\rangle\,\overline{\langle\mathbf{x}|\psi\rangle}\ .$$

In particolare si noti che $K^2 = 1$. Quindi, in termini della funzione d'onda $\psi(\mathbf{x}) = \langle\mathbf{x}|\psi\rangle$, avremo

$$(U_{\mathcal{T}}\psi)(\mathbf{x}) = \overline{\psi(\mathbf{x})}\ .$$

In effetti K, che è manifestamente antiunitario, lascia invariato l'operatore di moltiplicazione $\mathbf{X}$, in quanto $\mathbf{x}$ è per ipotesi reale, mentre cambia segno a $\mathbf{P} = -i\nabla$, in quanto ∇ ha elementi di matrice reali tra i vettori di stato generalizzati $|\mathbf{x}\rangle$. Per quanto riguarda la Hamiltoniana nel campo esterno definito dalla coppia $\mathbf{A}$ e ϕ (vedi§9.3.10), abbiamo evidentemente ($\mathbf{A}$ e ϕ sono reali per definizione):

$$\mathcal{T}H(\mathbf{A},\phi) = U_{\mathcal{T}}^{\dagger}H(\mathbf{A},\psi)U_{\mathcal{T}}\big|_{t\to -t} = H(\mathcal{T}\mathbf{A},\mathcal{T}\psi)\ ,$$

dove $(\mathcal{T}\mathbf{A})(\mathbf{x},t) = -\mathbf{A}(\mathbf{x},-t)$ e $(\mathcal{T}\phi)(\mathbf{x},t) = \phi(\mathbf{x},-t)$. Si noti che queste sono proprio le leggi di trasformazione sotto inversione temporale dei potenziali elettromagnetici classici. In particolare, la dinamica è invariante se e solo se $\mathcal{T}\mathbf{A}$ e $\mathcal{T}\psi$ differiscono da $\mathbf{A}$ e ϕ per una trasformazione di gauge, ovvero

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},t) + \mathbf{A}(\mathbf{x},-t) = -\nabla\chi(\mathbf{x},t)\ ,$$
$$\phi(\mathbf{x},t) - \phi(\mathbf{x},-t) = -\frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{x},t)\ .$$

Nel caso di potenziali indipendenti dal tempo, l'invarianza sotto $\mathcal{T}$ non pone vincoli su $\phi(\mathbf{x})$, mentre richiede che $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ sia un puro gauge, cioè $\mathbf{B} = \nabla\wedge\mathbf{A} = 0$.

Una volta definita in una base specifica, la forma esplicita di $U_{\mathcal{T}}$ risulta fissata in ogni altra base tramite le regole generali della meccanica quantistica (si noti che la definizione di K dipende dalla base, per cui $U_{\mathcal{T}}$ non si ridurrà alla semplice coniugazione complessa in altre rappresentazioni). Ad esempio, sugli autovettori del momento abbiamo

$$U_{\mathcal{T}}|\mathbf{k}\rangle = \int d^3x\ |\mathbf{x}\rangle\,\overline{\langle\mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle} = |-\mathbf{k}\rangle\ ,$$

dato che $\langle\mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})$. Quindi

$$U_{\mathcal{T}}|\psi\rangle = \int d^3k\ |-\mathbf{k}\rangle\,\overline{\langle\mathbf{k}|\psi\rangle} = \int d^3p\ |\mathbf{k}\rangle\,\overline{\langle-\mathbf{k}|\psi\rangle}\ ,$$

ovvero

$$(U_{\mathcal{T}}\tilde{\psi})(\mathbf{k}) = \overline{\tilde{\psi}(-\mathbf{k})}\ ,$$

dove $\tilde{\psi}$ è la trasformata di Fourier di ψ.

L'inclusione dello spin richiede di modificare l'identificazione $U_{\mathcal{T}} = K$, in quanto gli operatori di spin S_x, S_y e S_z non possono avere tutti e tre elementi di matrice puramente immaginari o puramente reali in alcuna base fissata. Come sappiamo però dal §8.2.5, nella base in cui S_z è diagonale possiamo sempre fissare le fasi in modo tale che S_x e S_z abbiano elementi di matrice reali, mentre S_y ha elementi di matrice immaginari puri. Quindi

$$KS_xK = S_x\ ,\quad KS_yK = -S_y\ ,\quad KS_zK = S_z\ .$$

Ponendo allora

$$U_{\mathcal{T}} = YK\,, \quad Y \equiv e^{-i\pi S_y} \tag{9.78}$$

(in particolare $Y = -i\sigma_y$ per spin 1/2) si ottiene subito la (9.75), in quanto

$$Y^\dagger S_x Y = -S_x\,, \quad Y^\dagger S_y Y = S_y\,, \quad Y^\dagger S_z Y = -S_z\,.$$

La forma di $U_{\mathcal{T}}$ in ogni altra rappresentazione segue dalle regole solite a partire dalla (9.78).

Dalla definizione stessa di inversione temporale (o in base alle leggi di trasformazione (9.74) e (9.75)), è evidente che $U_{\mathcal{T}}^2$ deve ridursi ad un multiplo unimodulare dell'identità: $U_{\mathcal{T}}^2 = e^{i\alpha}\mathbb{1}$. D'altronde, per la natura antiunitaria di $U_{\mathcal{T}}$ e legge associativa,

$$e^{-i\alpha}U_{\mathcal{T}} = U_{\mathcal{T}}e^{i\alpha} = U_{\mathcal{T}}U_{\mathcal{T}}^2 = U_{\mathcal{T}}^2U_{\mathcal{T}} = e^{i\alpha}U_{\mathcal{T}}\,,$$

per cui $U_{\mathcal{T}}^2 = \pm\mathbb{1}$. Nel caso della realizzazione esplicita (9.78) valida per la singola particella, otteniamo

$$U_{\mathcal{T}}^2 = YKYK = e^{-i\pi S_y}e^{+i\pi(-S_y)} = e^{-2i\pi S_y}\,.$$

Ma $\mathbf{S}$ commuta con il momento angolare orbitale $\mathbf{L}$ e $e^{-2i\pi L_y} = 1$, per cui possiamo porre $U_{\mathcal{T}}^2 = e^{-2i\pi J_y}$, dove $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Infine, componendo moltiplicativamente $U_{\mathcal{T}}$ per un sistema di N particelle,

$$U_{\mathcal{T}}^2 = e^{-2i\pi J_y}$$

dove $\mathbf{J} = \sum_j(\mathbf{L}_j + \mathbf{S}_j)$ è il momento angolare totale. Quindi

$$U_{\mathcal{T}}^2 = (-1)^{N_F}\,\mathbb{1}$$

dove N_F è il numero di fermioni, ovvero particelle con spin semintero, del sistema fisico in esame.

PROBLEMA 9.5-8 []Si dimostri il **teorema di Kramer**, il quale afferma che se il sistema conservativo $\mathcal{S}$ contiene un numero dispari di particelle con spin semintero ed è governato da una Hamiltoniana invariante sotto inversione temporale, allora ogni autovalore dell'energia è almeno doppiamente degenere. Gli unici ingredienti necessari sono: (i) $HU_{\mathcal{T}} = U_{\mathcal{T}}H$; (ii) $U_{\mathcal{T}}$ è antiunitario; (iii) $U_{\mathcal{T}}^2 = -1$. *Questo teorema risulta rilevante nella fisica atomica, in quanto implica che non è sempre possibile rimuovere tutte le degenerazioni dei livelli energetici dovute all'invarianza per rotazioni, solo facendo ricorso a campi elettrici, i quali sono pari sotto* $\mathcal{T}$.

9.5.4. Il principio di microreversibilità. Nel precedente paragrafo abbiamo visto come la richiesta di covarianza dell'equazione di Schroedinger fissi la legge di trasformazione dell'Hamiltoniana sotto inversione temporale (vedi Eq. (9.77)). Nella visione attiva essa assume la forma

$$H(t) \longrightarrow \mathcal{T}H(t) = U_{\mathcal{T}}^{\dagger} H(-t) U_{\mathcal{T}} \tag{9.79}$$

In effetti, tenuto conto che l'operatore di evoluzione temporale $U(t, t_0)$ si scrive (§7.7, Eq. (7.84))

$$U(t, t_0) = \mathbb{T} \exp\left[-i \int_{t_0}^{t} dt' \, H(t')\right]$$

possiamo verificare subito che

$$\begin{aligned} \mathcal{T}U(t, t_0) &\equiv \mathbb{T} \exp\left[-i \int_{t_0}^{t} dt' \, \mathcal{T}H(t')\right] \\ &= U_{\mathcal{T}}^{\dagger} \, \mathbb{T} \exp\left[+i \int_{t_0}^{t} dt' \, H(-t')\right] U_{\mathcal{T}} \\ &= U_{\mathcal{T}}^{\dagger} U(-t, -t_0) U_{\mathcal{T}} \end{aligned}$$

com'è naturale attendersi dall'inversione dell'asse dei tempi.

La relazione (9.79) suggerisce $\mathcal{T}H = H$ come condizione di invarianza della dinamica sotto $\mathcal{T}$. Per l'esattezza, la formulazione più generale di tale condizione è evidentemente

$$\mathcal{T}U(t, t_0) = e^{i\alpha(t, t_0)} U(t, t_0)$$

dove $\alpha(t_0, t_0) = 1$ e $\alpha(t, t_0) = -\alpha(t_0, t)$ per costruzione. Insieme alla legge di composizione di $U(t, t_0)$ questo impone $\alpha(t, t_0) = \tilde{\alpha}(t) - \tilde{\alpha}(t_0)$. Infine la natura antiunitaria di $U_{\mathcal{T}}$ insieme a $U_{\mathcal{T}}^2 = (-1)^{N_F}$ richiede che $\tilde{\alpha}(t) = \tilde{\alpha}(-t)$. Ma allora possiamo porre $\tilde{\alpha}(t) = \beta(t) + \beta(-t)$ e, ancora grazie all'antilinearità di $U_{\mathcal{T}}$, riassorbire il fattore di fase β-dipendente in una innocua ridefinizione di $U(t, t_0)$. In definitiva abbiamo verificato che la richiesta di invarianza sotto $\mathcal{T}$ si riduce sempre a

$$U(-t, -t_0) = U_{\mathcal{T}} \, U(t, t_0) \, U_{\mathcal{T}}^{\dagger} \tag{9.80}$$

che equivale esattamente a $U_{\mathcal{T}}^{\dagger} H(-t) U_{\mathcal{T}} = H(t)$. La relazione (9.80) rende evidente che *non esiste alcuna legge di conservazione associata all'invarianza per inversione temporale.* Infatti $U(t, t_0)^{\dagger} U_{\mathcal{T}} U(t, t_0)$ non è proporzionale a $U_{\mathcal{T}}$.

Se il sistema $\mathcal{S}$ è conservativo, allora

$$U(t, t_0) = \exp[-i(t - t_0)H] = U(-t_0, -t)$$

e la condizione per una dinamica $\mathcal{T}$-invariante si scrive

$$U(t_0, t) = U_{\mathcal{T}} \, U(t, t_0) \, U_{\mathcal{T}}^{\dagger} \tag{9.81}$$

Possiamo allora formulare la richiesta di invarianza sotto forma del cosiddetto **principio di microreversibilità**; esso afferma che, per un sistema isolato, la probabilità di trovare $\mathcal{S}$ nello stato $|\phi\rangle$ al tempo t, se $\mathcal{S}$ era stato preparato nello stato $|\psi\rangle$ al tempo t_0, è uguale alla probabilità di trovare $\mathcal{S}$ nello stato $|\mathcal{T}\psi\rangle$ al tempo t, avendo preparato $\mathcal{S}$ nello stato $|\mathcal{T}\phi\rangle$ al tempo t_0. In formule:

$$|\langle\phi|\,U(t,t_0)\,|\psi\rangle|^2 = |\langle\mathcal{T}\psi|\,U(t,t_0)\,|\mathcal{T}\phi\rangle|^2 \tag{9.82}$$

come si deriva immediatamente dalla (9.81). Viceversa, se il principio di microreversibilità (9.82) vale per ogni coppia di vettori di stato $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$, allora $U(t,t_0)$ differisce da $U_{\mathcal{T}}^{\dagger}U(t_0,t)U_{\mathcal{T}}$ al più per un fattore di fase. Essendo $U_{\mathcal{T}}$ antiunitario, questo fattore si riduce a $\pm$, e per continuità a $t = t_0$ si riduce infine a 1, riproducendo la (9.81).

L'applicazione del principio di microreversibilità ai fenomeni di diffusione (o *scattering*) produce il cosiddetto *principio del bilancio dettagliato*. Senza entrare nei particolari, che esulano dai nostri scopi presenti, in regime nonrelativistico possiamo descrivere le cose nei seguenti termini. Lo stato iniziale $|\psi\rangle$, al tempo $t_0 \to -\infty$, descrive per ipotesi le particelle 1 e 2, con momenti $\mathbf{p}_1$, $\mathbf{p}_2$ e proiezioni dei rispettivi spin m_1 e m_2 lungo un dato asse $\mathbf{n}$. Analogamente lo stato finale, al tempo $t \to \infty$, descrive le particelle 3 e 4, con momenti e proiezioni degli spin $\mathbf{p}_3$, m_3, $\mathbf{p}_4$ e m_4. Ora, se l'interazione fra le particelle è invariante per inversione temporale ed inversione spaziale, allora le probabilità di transizione del processo diretto e del processo inverso coincidono,

$$\begin{aligned}
&\Pr(\mathbf{p}_1,m_1\,;\,\mathbf{p}_2,m_2 \to \mathbf{p}_3,m_3\,;\,\mathbf{p}_4,m_4)\\
&\qquad = \Pr(-\mathbf{p}_3,-m_3\,;\,-\mathbf{p}_4,-m_4 \to -\mathbf{p}_1,-m_1\,;\,-\mathbf{p}_2,-m_2)\\
&\qquad = \Pr(\mathbf{p}_3,m_3\,;\,\mathbf{p}_4,-m_4 \to \mathbf{p}_1,m_1\,;\,\mathbf{p}_2,-m_2)\,,
\end{aligned}$$

dato che i momenti $\mathbf{p}_j$ sono dispari sotto $\mathcal{T}$ e $\mathcal{P}$, gli operatori di spin $\mathbf{S}_j$ sono dispari sotto $\mathcal{T}$ e pari sotto $\mathcal{P}$ ed infine l'asse $\mathbf{n}$ di quantizzazione degli spin è pari sotto $\mathcal{T}$ e dispari sotto $\mathcal{P}$. Nel caso che la parità sia violata e/o che le particelle siano cariche il principio del bilancio dettagliato vale in una versione opportunamente ridotta. In ogni esso fornisce un modo diretto per controllare la validità del principio di microreversibilità, e quindi l'invarianza per inversione temporale, nel caso delle interazioni fondamentali. Attualmente l'evidenza sperimentale sostiene questo principio, entro errori relativi dell'ordine di 10^{-3}, per tutti i processi governati dalle interazioni forte, elettromagnetica e debole[10].

[10] Vi sono tuttavia risultati sperimentali indiretti e ragioni teoriche profonde per ritenere che l'invarianza per inversione temporale sia violata, anche se molto debolmente, dalle interazioni deboli.

PROBLEMA 9.5-9 [] Si dimostri che un sistema governato da una dinamica invariante per rotazioni e inversione temporale non può avere un momento di dipolo elettrico permanente, se la degenerazione dei livelli energetici è dovuta solamente all'invarianza per rotazione.

SOLUZIONE *[]Per ipotesi la Hamiltoniana ammette un insieme completo di autovettori* $|E, J, M\rangle$ *con momento angolare totale definito. Inoltre* $U_{\mathcal{T}}|E, J, M\rangle$ *deve essere proporzionale a* $|E, J, -M\rangle$*, tramite un fattore di fase, poiché* H *e* $\mathbf{J}$ *sono rispettivamente pari e dispari sotto inversione temporale e la degenerazione è per ipotesi dovuta solo al numero quantico* M*. Quindi*

$$\langle E, J, -M|\,\mathbf{J}\,|E, J, -M\rangle = -\langle E, J, M|\,\mathbf{J}\,|E, J, M\rangle \ .$$

D'altra parte il dipolo elettrico $\mathbf{d}$ *è pari sotto* $U_{\mathcal{T}}$*, per cui*

$$\langle E, J, -M|\,\mathbf{d}\,|E, J, -M\rangle = \langle E, J, M|\,\mathbf{d}\,|E, J, M\rangle \ .$$

Ma per l'applicazione 8.3.1 del teorema di Wigner-Eckart, dobbiamo avere

$$\langle E, J, M|\,\mathbf{d}\,|E, J, M'\rangle = \frac{\langle E, J\|d\|E, J\rangle}{[J(J+1)]^{1/2}}\,\langle E, J, M|\,\mathbf{J}\,|E, J, M'\rangle \ ,$$

che insieme alle due precedenti relazioni forza $\langle E, J, M|\,\mathbf{d}\,|E, J, M'\rangle = 0$*. Questo risultato è rilevante in particolare per le particelle elementari soggette all'interazione debole, la quale viola la parità e quindi non impedisce a prima vista un dipolo elettrico permanente (vedi Probl. 9.5-7 a p. 348).*

CAPITOLO 10

Metodi di approssimazione

10.1. Teoria delle perturbazioni

Track 1

Per qualunque problema fisico è in generale necessario costruire la soluzione per approssimazioni successive; una prima schematizzazione tiene conto delle interazioni più rilevanti e sulla base della soluzione del sistema semplificato si cercano poi di includere gli effetti delle altre interazioni. Questo schema risale alla meccanica celeste: la dinamica dei pianeti è descritta dalle orbite di Keplero che tengono conto della sola attrazione del Sole, mentre le mutue attrazioni di pianeti e satelliti possono essere incluse come correzioni; ad uno stadio successivo si vorrà poi tenere conto di altri effetti più fini, quali quelli prodotti dalla deviazione dalla forma perfettamente sferica del Sole o dalle correzioni relativistiche. L'importante per l'analisi di un problema complesso è riuscire ad individuare la gerarchia di importanza delle varie interazioni in modo da stimare l'ordine di grandezza delle correzioni. Per un calcolo quantitativo si deve sviluppare un algoritmo che permetta di valutare le correzioni alla precisione desiderata. La natura lineare delle equazioni della meccanica quantistica facilita di molto il compito, rispetto al problema analogo che si deve affrontare in meccanica classica, in regime non-lineare; le questioni legate alla stima a priori degli errori invece costituiscono un problema assai spinoso. In genere infatti le correzioni successive formano una serie divergente a cui si cerca di dare un significato in termini di serie asintotiche (vedi App. B.2).

Considereremo anzitutto il problema della determinazione dello spettro dell'Hamiltoniano (*teoria delle perturbazioni stazionarie*), problema tipico per un sistema isolato. Un sistema in interazione con un campo esterno può altresì porre il problema di un'interazione dipendente dal tempo, nel qual caso gli autostati dell'Hamiltoniano *imperturbato* (ossia in assenza di interazione con l'esterno) non sono più stati stazionari e la domanda interessante riguarda la probabilità di transizione da uno stato all'altro. Questo problema è coperto dalla teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo.

10.1.1. Perturbazioni stazionarie. Consideriamo un Hamiltoniano della forma

$$H = H_0 + \varepsilon V,$$

dove H_0 rappresenta un certo stadio di approssimazione del problema fisico che assumiamo completamente risolto, mentre V rappresenta una nuova interazione di cui vogliamo tenere conto; il parametro ε può essere una costante fisica che entra nella descrizione dell'interazione (**costante di accoppiamento**), oppure è un numero puro introdotto al puro scopo di differenziare l'interazione V dal resto delle interazioni e che alla fine dovrà essere posto uguale a uno. Si assume perciò nota la decomposizione spettrale di H_0, e per semplicità assumiamo che si tratti di spettro discreto con autovalori non-degeneri. Il caso più generale verrà discusso più avanti. Sia dunque E_0 l'autovalore di cui vogliamo valutare la correzione e $|E_0\rangle$ il corrispondente autovettore. Dobbiamo determinare autostato e autovalore dell'Hamiltoniano completo

$$H\,|E_\varepsilon\rangle = E_\varepsilon\,|E_\varepsilon\rangle$$

tali che per $\varepsilon \to 0$ valgano i due limiti[1]

$$\lim_{\varepsilon\to 0} E_\varepsilon = E_0, \quad \lim_{\varepsilon\to 0} |E_\varepsilon\rangle = |E_0\rangle \ .$$

L'ipotesi che si fa a questo punto è la seguente: *autovalori ed autovettori di* H *ammettono uno sviluppo in serie di potenze nel parametro* ε. L'ipotesi è del tutto ragionevole trattandosi di soluzioni di equazioni differenziali in cui ε compare come parametro, tuttavia la natura della serie di potenze è a priori puramente formale. La convergenza della **serie perturbativa**, come verranno d'ora in poi denominate le serie di potenze in teoria delle perturbazioni, è da verificare caso per caso, e di norma non si avvera[2]. Anche negli esempi più semplici ci si trova di fronte a serie divergenti ma che non di meno forniscono un utilissimo strumento di calcolo approssimato in quanto **serie asintotiche** (ciò era ben noto agli astronomi già alla fine del secolo scorso; la teoria matematica è sviluppata in [**Har91, RS78a**], e a livello elementare in App. B.2): sotto opportune condizioni è possibile infatti ricostruire la funzione dalla sua serie asintotica. A questo scopo è necessario però disporre di un grande numero di coefficienti della serie, il che non è sempre possibile (vedi Probl. 10.1-1).

[1] Si tratta di un'ipotesi di lavoro; non è difficile infatti costruire esempi in cui questi limiti non valgono (fenomeno di Klauder); nei casi noti il potenziale V è singolare (vedi ad es. [**Sim73**] e il Probl. 10.1-2 a p. 364).

[2] Una condizione sufficiente è data dalla condizione di Kato: la serie perturbativa ha un raggio di convergenza finito se il potenziale di perturbazione V è limitato *relativamente ad* H_0, e cioè $\|V\psi\| \le a\|H_0\psi\| + b\|\psi\|, (a < 1)$ [**Kat76, RS78a**] (vedi Probl. 6 a p. 538).

Nel seguito affronteremo il problema di base, quello cioè di determinare i coefficienti della serie perturbativa. Cominciamo col definire gli sviluppi

$$|E_\varepsilon\rangle = |0\rangle + \varepsilon\,|\eta_1\rangle + \varepsilon^2\,|\eta_2\rangle + \dots \tag{10.1}$$

$$E_\varepsilon = E_0 + \delta_1\varepsilon + \delta_2\varepsilon^2 + \dots \tag{10.2}$$

dove i coefficienti reali δ_k e i vettori $|\eta_1\rangle, |\eta_2\rangle, \dots$ sono da determinarsi e sostituiamo il tutto nell'equazione agli autovalori. Identificando i coefficienti delle varie potenze in ε si ottiene, almeno in linea di principio, la soluzione. In realtà è preferibile procedere con un sistema di tipo ricorsivo, in base al quale, nota la soluzione all'ordine n, si ricava facilmente l'ordine $n+1$ (è questo d'altronde il modo in cui si imposta di norma il calcolo, dato che per il fisico poco importa conoscere la soluzione a un dato ordine ε^k senza conoscere il contributo in ε^{k-1}, a priori più rilevante). La relazione di ricorrenza si determina in questo modo (vedi [**Sak90**]): riordiniamo i termini dell'equazione per ottenere

$$(H_0 - E_0)\,|E_\varepsilon\rangle = (E_\varepsilon - E_0)\,|E_\varepsilon\rangle - \varepsilon V\,|E_\varepsilon\rangle\ . \tag{10.3}$$

Prendendo il prodotto scalare dello stato $|E_0\rangle$ con ambo i membri si avrà

$$0 = (E_\varepsilon - E_0)\,\langle E_0|\,E_\varepsilon\rangle - \varepsilon\,\langle E_0|\,V\,|E_\varepsilon\rangle$$

(avendo sfruttato il fatto che H_0 è autoaggiunto) e quindi

$$E_\varepsilon - E_0 = \varepsilon\frac{\langle E_0|\,V\,|E_\varepsilon\rangle}{\langle E_0|\,E_\varepsilon\rangle}\ . \tag{10.4}$$

Conviene a questo punto adottare temporaneamente una normalizzazione diversa dal consueto per l'autovettore $|E_\varepsilon\rangle$

$$\langle E_0|\,E_\varepsilon\rangle = 1,$$

una convenzione che semplifica notevolmente lo sviluppo delle formule. A conti fatti sarà ovviamente possibile fissare la normalizzazione consueta moltiplicando per un fattore di normalizzazione. L'unica difficoltà potrebbe provenire nell'eventualità che l'autovettore esatto sia ortogonale a $|E_0\rangle$, ma ciò non potrà verificarsi per ε sufficientemente piccolo. Se inseriamo lo sviluppo in serie (10.1), ed uguagliamo i coefficienti ad ogni ordine in ε^k otteniamo infatti

$$\boxed{\delta_k = \langle E_0|\,V\,|\eta_{k-1}\rangle} \tag{10.5}$$

Riprendiamo ora l'Eq. (10.3); ci si chiede se siamo autorizzati ad invertire l'operatore $H_0 - E_0$ per ottenere

$$|E_\varepsilon\rangle = |E_0\rangle + R_0(E_0)\,(E_\varepsilon - E_0 - \varepsilon V)\,|E_\varepsilon\rangle\ .$$

L'operatore **risolvente** $R_0(z) \equiv (H_0 - z\mathbb{1})^{-1}$ è definito per ogni valore reale o complesso di z, *ad eccezione dei punti dello spettro di* H_0. Tuttavia i

vettori a cui dobbiamo applicare $R(E_0)$ sono tutti ortogonali al vettore $|E_0\rangle$ e perciò l'inversione è legittima. Il calcolo del risolvente è ottenibile semplicemente da

$$R_0(E_0)\left|E_0'\right\rangle = \frac{\left|E_0'\right\rangle}{E_0' - E_0}$$
$$R_0(E_0)\,|E_0\rangle \equiv 0\ .$$

Se a questo punto inseriamo gli sviluppi in serie nell'equazione precedente otteniamo la seconda relazione di ricorrenza

$$\boxed{|\eta_k\rangle = R(E_0)\left(\sum_{j=1}^{k-1}\delta_j\left|\eta_{k-j}\right\rangle - V\,|\eta_{k-1}\rangle\right)} \tag{10.6}$$

Le Eq. (10.5),(10.6) formano un *algoritmo ricorsivo* che in linea di principio può generare i coefficienti della serie perturbativa ad ogni ordine. Il vantaggio di questa impostazione è di permettere una notevole economia di calcolo; inoltre l'algoritmo è facilmente codificabile per un calcolo automatico.

PROBLEMA 10.1-1 [] Determinare i primi termini della serie perturbativa per lo stato fondamentale dell'Hamiltoniano

$$H = \tfrac{1}{2}(p^2 + q^2) + \varepsilon q^4\ .$$

SOLUZIONE *[]Conviene utilizzare gli operatori di creazione-annichilazione, e quindi riscrivere l'Hamiltoniano nella forma*

$$H = a^\dagger a + \tfrac{1}{2} + \tfrac{1}{4}\varepsilon(a + a^\dagger)^4$$

(utilizziamo per semplicità unità di misura in cui $\hbar = \omega = m = 1$). In qualunque relazione di ricorrenza bisogna individuare per prima cosa gli elementi costanti (da calcolare una volta sola). Nel nostro caso è ovvio che conviene calcolare subito il vettore $\langle E_0|V$ che compare nella prima relazione di ricorrenza. Si trova, facendo uso delle relazioni 6.8 a p. 128,

$$\begin{aligned} V\,|0\rangle &= \frac{1}{4}(a + a^\dagger)^4\,|0\rangle \\ &= \frac{1}{4}(a + a^\dagger)^3\,|1\rangle \\ &= \ldots = \frac{3}{4}\,|0\rangle + \frac{3\sqrt{2}}{2}\,|2\rangle + \frac{\sqrt{6}}{2}\,|4\rangle\ . \end{aligned}$$

Per quanto riguarda il risolvente $(a^\dagger a)^{-1}$, questo agisce sugli autostati di H_0 semplicemente così

$$R_0\,|n\rangle = \frac{1}{n}\,|n\rangle\,,\ (n > 0),\ R_0\,|0\rangle = 0\ .$$

n	δ_n
1	3/4
2	−21/8
3	333/16
4	−30885/128
5	916731/256
6	−65518401/1024
7	2723294673/2048
8	−1030495099053/32768
9	54626982511455/65536
10	−6417007431590595/262144
11	413837985580636167/524288
12	−11634486317328454366 5/4194304

TABELLA 10-1. *Sviluppo perturbativo dello stato fondamentale per l'operatore* $a^\dagger a + \frac{1}{2} + \varepsilon q^4$.

Si ottiene perciò

$$\begin{aligned}
\delta_1 &= \langle 0|\, V\, |0\rangle = \frac{3}{4} \\
|\eta_1\rangle &= R_0(0)(-V\,|0\rangle) = -\frac{3\sqrt{2}}{4}\,|2\rangle - \frac{\sqrt{6}}{8}\,|4\rangle \\
\delta_2 &= \langle 0|\, V\, |\eta_1\rangle = -\frac{21}{8}\,.
\end{aligned}$$

Il calcolo si effettua agevolmente utilizzando un programma simbolico quale schoonschip/form *o* mathematica *e fornisce la serie di coefficienti riportata in Tab. 10-1. Si nota che i coefficienti* δ_n *tendono a crescere molto rapidamente, più di quanto sarebbe richiesto dalla convergenza della serie. Bender e Wu (*[**BW69**]*) hanno per primi ricavato un grande numero di coefficienti (fino a* $\delta_{75} \approx 0.75 \times 10^{144}$*) e dimostrato l'andamento asintotico*

$$\delta_n \approx (-1)^{n+1}\sqrt{6/\pi^3}\; 3^n\, \Gamma(n + 1/2)\,. \tag{10.7}$$

Disponendo di un elevato numero di coefficienti è pensabile affrontare il compito di "risommare" la serie divergente. La tecnica più semplice è costituita dall'introduzione di approssimanti razionali, noti come approssimanti di Padé [**BGM81**]. *L'idea consiste nel determinare due polinomi* $P(\varepsilon)$ *e* $Q(\varepsilon)$ *di grado* n_P *ed* n_Q *(con* $N = n_P + n_Q$*), in modo che valga la relazione*

$$\sum_{n=1}^{N} \delta_n \varepsilon^n = \frac{P(\varepsilon)}{Q(\varepsilon)} + O(\varepsilon^{N+1})\,.$$

La forma razionale P/Q *è molto più flessibile di quella rappresentata dai semplici polinomi. In particolare è possibile approssimare fedelmente funzioni analitiche con singolarità. La Tab. 10-2 confronta il risultato della risommazione della serie perturbativa per l'oscillatore anarmonico con i valori ottenuti per via numerica*

ε	$\sum \delta_n \varepsilon^n$	P/Q	*Ref.*[**HM75**]
0.002	*0.50149*	*0.50148966*	*0.50148966*
0.01	*0.507256*	*0.50725620*	*0.50725620*
0.1	*0.565*	*0.55914633*	*0.55914633*
0.5	-	*0.69617385*	*0.69617582*
1.0	-	*0.80366865*	*0.80377065*
2.0	-	*0.94972612*	*0.95156847*
50.	-	*1.71143505*	*2.49970877*

TABELLA 10-2. *Risommazione di Padé della serie perturbativa per lo stato fondamentale dell'oscillatore anarmonico.*

diretta. Per una vasta trattazione dei problemi connessi alla risommazione della serie perturbativa in meccanica quantistica si veda [**Hir82**].

PROBLEMA 10.1-2 [] Un oscillatore armonico è perturbato da un'interazione del tipo $V = \beta/x^2$, $\beta > 0$. Discutere il limite per $\beta \to 0$.

SOLUZIONE *[]La perturbazione è di tipo singolare e non può trattarsi direttamente con il metodo perturbativo. Per quanto piccola sia la costante β, ci sarà una regione intorno a $x = 0$ in cui V è arbitrariamente grande. Il punto cruciale è il seguente: la barriera infinita in $x = 0$ presenta un ostacolo insormontabile con ampiezza di penetrazione nulla. La condizione da imporre sulla funzione d'onda è pertanto $\psi(0) = 0$ qualunque sia β purché diverso da zero. In questo caso il limite per $\beta \to 0$* **non** *è dato dall'Hamiltoniano con $\beta = 0$, bensì da un Hamiltoniano di oscillatore armonico con una condizione di annullamento in $x = 0$. Lo spettro "imperturbato" è perciò costituito dai soli livelli $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ con n dispari (le cui autofunzioni si annullano nell'origine) che risultano doppiamente degeneri. Che l'ampiezza di trasmissione della barriera di potenziale sia nulla si può arguire dall'approssimazione semiclassica che dà*

$$\tau \approx \exp\left(-\int |p| dx/\hbar\right) .$$

La singolarità di $p(E, x)$ in $x = 0$ infatti non è integrabile. Il problema è poi risolubile esattamente tenendo conto del fatto che l'equazione di Schroedinger è equivalente all'equazione radiale per un oscillatore tridimensionale con momento angolare tale che $\hbar^2 l(l + 1) = 2m\beta$.

PROBLEMA 10.1-3 []Determinare la correzione ai primi livelli di energia dell'atomo di idrogeno dovuti ad un ipotetico momento di dipolo elettrico del nucleo (il limite sperimentale sul momento di dipolo elettrico del protone è dato da $|\varepsilon| < 10^{-9}$ e fm; si vedano i problemi 9.5-7 a p. 348 e 9.5-9 a p. 358).

SOLUZIONE *[]L'effetto sui livelli energetici è dato da un termine correttivo*

$$V = -\frac{e\varepsilon}{r^2}\cos\vartheta$$

all'energia potenziale. Per il livello fondamentale la correzione al primo ordine è nulla per simmetria ($\langle\cos\vartheta\rangle = 0$). Per valutare la correzione al secondo ordine ci serviamo della relazione

$$\cos\vartheta\, Y_l^m(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{(l+1-m)(l+1+m)}{(2l+1)(2l+3)}}\, Y_{l+1}^m + \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}}\, Y_{l-1}^m$$

che costituisce un caso particolare del teorema di Wigner-Eckart, ed è deducibile dalla relazione di ricorrenza delle funzioni associate di Legendre

$$(2l+1)xP_l^m(x) = (l-m+1)P_{n+1}^m(x) + (n+m)P_{l-1}^m(x)\ .$$

Si avrà pertanto

$$\delta^2 E_1 = -\frac{1}{3}\sum_{n=2}^{\infty}\frac{|\langle 1,0|\cos\vartheta/r^2\,|n,l=1\rangle|^2}{1-n^{-2}}$$

dove esprimiamo tutto in unità atomiche ($\hbar = m = e = 1$). La somma si può valutare numericamente ($\delta^2 E_1 \approx 0.022$). Una stima dell'elemento di matrice per grandi valori di n si ottiene applicando la relazione (vedi ad es. [**GR65**]*)*

$$L_n^\alpha\left(\frac{x}{n}\right) \sim n^\alpha x^{-\alpha/2}\, J_\alpha(2\sqrt{x})$$

che porta alla relazione

$$\langle 10|\, r^{-2}\,|n1\rangle \underset{n\to\infty}{\sim} 0.541341\, n^{-3/2}$$

il che mostra che la serie che definisce $\delta^2 E_1$ è rapidamente convergente. (L'impostazione data alla soluzione assume che il momento di dipolo abbia un'orientazione fissa nello spazio o per lo meno lentamente variabile sulla scala dei tempi atomici).

10.1.2. Il teorema di Feynman-Helmann. Una conseguenza immediata della formula che esprime la correzione perturbativa al primo ordine è il seguente risultato, noto come *teorema di Feynman-Helmann*: l'Hamiltoniano $H(\lambda)$ dipenda parametricamente da una variabile reale λ. Siano $E_n(\lambda)$ e $|n,\lambda\rangle$ autovalori e autovettori di H. Allora vale la relazione

$$\langle n,\lambda|\,\frac{dH(\lambda)}{d\lambda}\,|n,\lambda\rangle = \frac{dE_n(\lambda)}{d\lambda}\ .$$

Sarà infatti $H(\lambda+\varepsilon) = H(\lambda) + \varepsilon dH/d\lambda + O(\varepsilon^2)$ e in accordo con la teoria delle perturbazioni

$$E_n(\lambda+\varepsilon) = E_n(\lambda) + \varepsilon\,\langle n,\lambda|\,\frac{dH(\lambda)}{d\lambda}\,|n,\lambda\rangle + O(\varepsilon^2)\ .$$

Il risultato si può ricavare anche senza invocare la teoria delle perturbazioni semplicemente derivando rispetto a λ la relazione $\langle n, \lambda | H | n, \lambda \rangle = E_n(\lambda)$ e tenendo conto che $\langle n, \lambda | n, \lambda \rangle \equiv 1$.

PROBLEMA 10.1-4 []Applicando il teorema di Feynman-Hellman, si ricavino gli elementi di matrice $\langle n | q^2 | n \rangle$ e $\langle n | p^2 | n \rangle$ per l'oscillatore armonico.

PROBLEMA 10.1-5 []Applicando il teorema di Feynman-Hellman, si ricavino gli elementi di matrice $\langle n | r^{-1} | n \rangle$ e $\langle n | r^{-2} | n \rangle$ per l'atomo di idrogeno.

10.1.3. Teoria delle perturbazioni per livelli degeneri. La teoria sviluppata nella sezione precedente deve essere modificata per affrontare il caso di livelli di energia *degeneri*. Indichiamo con $\{|E_0, \alpha\rangle, (\alpha = 1, 2, \ldots, r)\}$ una base ortonormale per il sottospazio di autovettori appartenenti all'autovalore imperturbato E_0. In assenza di perturbazione la base di autovettori è determinata solo a meno di una trasformazione unitaria $|E_0, \beta\rangle = U_{\alpha\beta} |E_0, \alpha\rangle$. La serie perturbativa per l'autovettore inizia perciò con una combinazione lineare arbitraria $\sum c_\alpha |E_0, \alpha\rangle$ e sarà la perturbazione a identificare la base corretta[3]. Le formule precedenti diventano allora

$$(H_0 - E_0) |\psi\rangle = (E - E_0 - \varepsilon V) |\psi\rangle \tag{10.8}$$

$$|\psi\rangle = \sum c_\alpha |E_0, \alpha\rangle + \sum_{n \geq 1} \varepsilon^n |\delta\psi_n\rangle \tag{10.9}$$

$$E = E_0 + \sum_{n \geq 1} \varepsilon^n \delta_n \tag{10.10}$$

Prendiamo il prodotto scalare della prima equazione con un generico autovettore imperturbato e otteniamo

$$\sum_{n \geq 1} \varepsilon^n \delta_n \langle E_0, \beta | \psi \rangle = \varepsilon \langle E_0, \beta | V | \psi \rangle \ .$$

Il termine del primo ordine in ε ci dà allora

$$\sum_\alpha \langle E_0, \beta | V | E_0, \alpha \rangle c_\alpha = \delta_1 c_\beta$$

che costituisce un'equazione agli autovalori per δ_1. La correzione al primo ordine per l'energia si ottiene perciò *diagonalizzando la matrice della perturbazione ristretta al sottospazio di degenerazione*. Assumendo che tutti i valori così ottenuti per δ_1 siano distinti possiamo ricondurci alla teoria

[3]Un esempio di questo fatto si ha in meccanica del corpo rigido: per una trottola simmetrica (due momenti di inerzia coincidenti) gli assi principali di inerzia ortogonali all'asse di simmetria non sono individuati univocamente, ma è sufficiente una piccola deformazione che rompa la simmetria per forzare la scelta univoca degli assi principali.

delle perturbazioni non-degeneri per il calcolo degli ordini più alti. Siamo infatti liberi di ridefinire H_0 nel modo seguente

$$H_0' = H_0 + \Pi_0 V \Pi_0$$

dove Π_0 è il proiettore ortogonale sul sottospazio di degenerazione.

Assumiamo invece che la degenerazione *non sia risolta* al primo ordine, ad esempio nel caso che tutti gli elementi di matrice $\langle E_0, \beta | V | E_0, \alpha \rangle$ siano nulli. I coefficienti c_α sono allora ancora indeterminati. Al secondo ordine si ottiene allora dall'Eq. (10.8)

$$|\psi\rangle = R_0 \left(\sum \delta_n \varepsilon^n - \varepsilon V \right) |\psi\rangle + \sum c_\alpha |E_0, \alpha\rangle$$

da cui

$$\begin{aligned} |\delta_1 \psi\rangle &= -R_0 V \sum c_\alpha |E_0, \alpha\rangle \\ \delta_2 c_\beta &= -\sum_\alpha \langle E_0, \beta | V R_0 V | E_0, \alpha \rangle c_\alpha, \end{aligned}$$

dove al solito nell'operatore R_0 è sottinteso il proiettore ortogonale al sottospazio appartenente all'autovalore E_0. Quest'ultima equazione *determina ad un tempo la correzione al secondo ordine e la base di autovettori all'ordine zero.*

Si consideri il seguente esempio: l'Hamiltoniano sia rappresentato dalla matrice

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & \varepsilon a \\ 0 & E_0 & \varepsilon b \\ \varepsilon a & \varepsilon b & E_0 + \Delta \end{pmatrix} .$$

Il livello degenere E_0 non è risolto al primo ordine e si deve pertanto diagonalizzare la matrice

$$\begin{aligned} \Pi_0 V R_0 V \Pi_0 = &\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & a \\ 0 & 0 & b \\ a & b & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta^{-1} \end{pmatrix} \times \\ \times &\begin{pmatrix} 0 & 0 & a \\ 0 & 0 & b \\ a & b & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = -\Delta^{-1} \begin{pmatrix} a^2 & ab & 0 \\ ab & b^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

che offre il risultato

$$\delta_2 = \begin{cases} 0 \\ -(a^2 + b^2)/\Delta \, . \end{cases}$$

Si può facilmente verificare questo risultato attraverso un calcolo esatto. Qualora anche al secondo ordine si dovesse avere una degenerazione residua sarà necessario invocare un'equazione analoga a ordini successivi.

PROBLEMA 10.1-6 []Dimostrare che la correzione al primo ordine dei livelli energetici in presenza di un momento di dipolo elettrico del nucleo si annulla e pertanto è necessario applicare l'equazione secolare al secondo ordine.

SOLUZIONE *[]Si tratta di valutare tutti gli elementi di matrice*

$$V_{nlm;nl'm'} = \langle nlm| \frac{\cos\vartheta}{r^2} |nl'm'\rangle \ .$$

Gran parte di questi elementi di matrice si annullano in base ad argomenti basati sulla teoria del momento angolare. Innanzitutto il potenziale ha simmetria assiale e dunque si avrà un valore nonnullo solo per $m = m'$. *Inoltre* $\cos\vartheta$ *è la componente di un vettore o in altri termini è una particolare armonica sferica* Y_l^m *con* $l = 1$, $m = 0$*: ciò implica che i momenti angolari* l *e* l' *devono potersi sommare ad un momento angolare uguale a 1 da cui si conclude che si annullano tutti gli elementi di matrice con* $|l - l'| > 1$. *Infine la parità del prodotto* $\overline{Y_l^m}\, Y_{l'}^m \cos\vartheta$ *è* $(-1)^{l+l'+1}$ *il che implica che* l *e* l' *devono avere parità diversa (l'elemento di matrice è rappresentato da un integrale la cui parte angolare* $\overline{Y_l^m} \cos\vartheta\, Y_{l'}^m$ *è antisimmetrica per inversione spaziale se* l *e* l' *hanno la stessa parità). Restano perciò da valutare gli elementi di matrice* $V_{n\,l\,m;n\,l+1\,m}, 0 \le l \le n-2$. *Si tratta di valutare gli integrali*

$$\int_0^\infty dr\, u_{nl}\, u_{n\,l+1}$$

dove la potenza r^2 *dell'elemento di volume è stata cancellata dal potenziale di dipolo. Per* $n = 2, 3$ *un calcolo diretto verifica che l'integrale si annulla. Per* n *più grandi il calcolo si effettua agevolmente con un programma simbolico quale* form *o* Mathematica.

10.1.4. Perturbazioni dipendenti dal tempo. La teoria sviluppata finora riguarda il caso di un sistema quantistico isolato il cui Hamiltoniano presenti in modo naturale una gerarchia di interazioni e che permette perciò lo studio della dinamica quantistica in successive fasi di approssimazione. Una strategia analoga può essere adottata in un caso fondamentalmente differente, quello di un sistema quantistico *non isolato* per il quale l'interazione con altri sistemi fisici possa considerarsi debole. Si pensi all'esempio di un atomo che venga a trovarsi immerso in un campo elettromagnetico: in questo caso l'Hamiltoniano risulta esprimibile in una forma simile a quanto considerato in precedenza

$$H = H_0 + \varepsilon V(t)$$

ma in generale si avrà che l'interazione dipende esplicitamente dal tempo. Il problema tipico non sarà più allora quello di determinare lo spettro perturbato (lo spettro di energia istante per istante non è di grande utilità, tranne che nel caso di interazioni in regime adiabatico), ma piuttosto

interesserà conoscere la probabilità che il sistema inizialmente in un qualche autostato di H_0 compia una transizione ad un autostato qualunque; nell'esempio dell'atomo, la radiazione elettromagnetica può *eccitare* l'atomo cedendo energia, oppure diseccitarlo assorbendola; compito della teoria è quello di calcolare le ampiezze di probabilità di questo tipo di processi. Indichiamo con $|\psi(t)\rangle$ lo stato del sistema al tempo t, soluzione dell'equazione

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H(t)\,|\psi(t)\rangle$$

essendo noto lo stato a un certo tempo t_0. Conviene considerare l'**operatore di evoluzione temporale** $U(t,t_0)$ in termini del quale $|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle$. L'operatore U soddisfa l'equazione

$$i\hbar\frac{d}{dt}U(t,t_0) = H(t)\,U(t,t_0)$$

e la condizione iniziale $U(t_0,t_0) = \mathbb{1}$. Dal momento che si vuole tenere conto della parte dipendente dal tempo quale debole perturbazione, si avrà che U differisce di poco dall'operatore imperturbato

$$U_0(t-t_0) = \exp\{-i(t-t_0)H_0/\hbar\}\ .$$

Ciò consiglia di porre $U = U_0\,W$, dove W sarà un altro operatore unitario che conterrà l'effetto della interazione. Sostituendo nell'equazione di evoluzione e prestando attenzione all'ordine degli operatori U_0 e W, in generale non commutanti, si ottiene

$$i\hbar\frac{d}{dt}W(t,t_0) = \varepsilon U_0(t-t_0)^\dagger\,V(t)\,U_0(t-t_0)\,W(t,t_0)\ .$$

Cerchiamo una soluzione nella forma $W(t,t_0) = \sum_n \varepsilon^n W_n(t,t_0)$: dall'equazione precedente si ottiene una relazione di ricorrenza

$$i\hbar\frac{d}{dt}W_{n+1}(t,t_0) = V_{\text{int}}(t,t_0)\,W_n(t,t_0)$$

avendo per semplcità introdotto il simbolo

$$V_{\text{int}}(t,t_0) = \varepsilon U_0(t,t_0)^\dagger\,V(t)\,U_0(t,t_0)\ .$$

Le condizioni iniziali per gli operatori W_n discendono da $W(t_0,t_0) = \mathbb{1}$ e cioè $W_n(t_0,t_0) = 0, n > 0$, mentre si avrà $W_0(t,t_0) = \mathbb{1}$, in quanto ciò

corrisponde alla soluzione per $\varepsilon = 0$. Si trova allora

$$\begin{aligned}
W_1(t,t_0) &= -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_{\rm int}(t',t_0)\,dt' \\
W_2(t,t_0) &= -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_{\rm int}(t',t_0)\,W_1(t',t_0)\,dt' \\
W_3(t,t_0) &= -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_{\rm int}(t',t_0)\,W_2(t',t_0)\,dt' \\
&\dots \\
W_{n+1}(t,t_0) &= -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_{\rm int}(t',t_0)\,W_n(t',t_0)\,dt' \\
&\dots
\end{aligned}$$

Se risolviamo la relazione di ricorrenza otteniamo una configurazione notevole (nota a Volterra nel secolo scorso) che assume la denominazione di **serie di Dyson** o **esponenziale cronologicamente ordinato**:

$$\begin{aligned}
W_2(t,t_0) &= (-\frac{i}{\hbar})^2\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t_1} V_{\rm int}(t_1,t_0)\,V_{\rm int}(t_2,t_0)\;dt_1\,dt_2 \\
W_3(t,t_0) &= (-\frac{i}{\hbar})^3\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t_1}\int_{t_0}^{t_2} V_{\rm int}(t_1,t_0)\,V_{\rm int}(t_2,t_0)\,V_{\rm int}(t_3,t_0)\,dt_1\,dt_2\,dt_3 \\
&\dots
\end{aligned}$$

Per comprendere meglio la struttura di questa costruzione[4], si noti che *se fossimo autorizzati a permutare liberamente gli operatori* dovremmo trovare un'espressione identica a

$$\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_{\rm int}(t',t_0)\,dt'\right\}\,.$$

Questa è infatti la soluzione nel caso che valga la relazione di commutazione a tempi arbitrari $[V_{\rm int}(t,t_0), V_{\rm int}(t',t_0)] = 0$, in quanto per operatori commutanti la funzione esponenziale gode della proprietà

$$\frac{d}{dt}\exp\{B(t)\} = \frac{dB(t)}{dt}\exp\{B(t)\}\,.$$

La soluzione generale rappresenta perciò la naturale estensione della funzione esponenziale al caso di operatori non-commutanti. Si constata facilmente che l'unica differenza rispetto all'esponenziale ordinario consiste nel fatto che nell'integrale multiplo che definisce $W_n(t,t_0)$ gli operatori $V_{\rm int}(t,t_0)$ compaiono ordinati cronologicamente, ossia $V_{\rm int}(t,t_0)$ si trova a sinistra di $V_{\rm int}(t',t_0)$ per $t > t'$. Utilizzando il simbolo di ordinamento cronologico introdotto al §7.7 si potrà scrivere semplicemente

$$W(t,t_0) = \mathbb{T}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_{\rm int}(\tau,t_0)\,d\tau\right\}\,.$$

[4] Si può esprimere concisamente la teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo con la identità $\exp\{A+B\} = \exp\{A\}\,\mathbb{T}\exp\{\int_0^1 ds\,e^{-sA}\,B\,e^{sA}\}$.

La semplicità formale di quest'ultima espressione non tragga in inganno; in generale si tratta solo di una scrittura compatta per lo sviluppo perturbativo. Per ulteriori dettagli di natura matematica si veda [**Mag54**]. Un risultato che si rivela talvolta utile è il seguente

$$\mathbb{T}\exp\left\{\int_0^t B(\tau)\,d\tau\right\} = \exp\{\Omega(t)\}$$

$$\Omega(t) = \int_0^t B(\tau)\,d\tau + \tfrac{1}{2}\int_0^t\int_0^\tau [B(\tau), B(\sigma)]\,d\tau d\sigma + \dots$$

dove i puntini stanno per termini che coinvolgono almeno commutatori doppi. Questa formula permette di valutare in forma chiusa l'esponenziale cronologicamente ordinato nel caso che gli operatori $V_{\text{int}}(t)$ commutino a tempi diversi o più in generale abbiano un commutatore multiplo dell'identità ($[V_{\text{int}}(t), V_{\text{int}}(s)] = c(t,s)\mathbb{1}$). In termini degli operatori $W_n(t,t_0)$ possiamo ora determinare l'ampiezza di transizione da un autostato $|n\rangle$ di H_0 ad un altro $|m\rangle$ sotto l'azione della perturbazione $V(t)$. Si avrà al primo ordine in ε:

$$A_{n\to m}(t,t_0) = \langle m|\,U(t,t_0)\,|n\rangle = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}E_m(t-t_0)\right\}\langle m|\,W(t,t_0)\,|n\rangle$$

$$\langle m|\,W(t,t_0)\,|n\rangle = \delta_{nm} - i\varepsilon/\hbar\int_{t_0}^t \langle m|\,V_{\text{int}}(t',t_0)\,|n\rangle\;dt' + O(\varepsilon^2)$$

$$= \delta_{nm} - i\varepsilon/\hbar\int_{t_0}^t \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)(t'-t_0)\right\}\langle m|\,V(t')\,|n\rangle\;dt' + O(\varepsilon^2)\,.$$

Per fissare le idee, supponiamo che la perturbazione agisca in un intervallo di tempo $(0,T)$ e si desideri valutare la probabilità di transizione $P_{n\to m}(t)$ per un tempo $t > T$. Si avrà allora

$$P_{n\to m}(t) = P_{n\to m}(T) = |A_{n\to m}(T,0)|^2$$

dove A è dato dall'equazione precedente. Se ne deduce che affinché la transizione $n \to m$ abbia un contributo rilevante già al primo ordine perturbativo è necessario che l'elemento di matrice $\langle m|\,V(t)\,|n\rangle$ non si annulli e abbia inoltre una forte componente di Fourier in corrispondenza alla **frequenza di Bohr** $(E_m - E_n)/\hbar$.

PROBLEMA 10.1-7 []Un oscillatore armonico di frequenza propria ω e massa m, inizialmente nel suo stato fondamentale, è soggetto ad una perturbazione della forma $V = \varepsilon f(q,t)$. Determinare l'ampiezza di transizione ad uno stato eccitato $|n\rangle$ nel caso

$$f(q,t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ q^K \sin\omega' t & 0 < t < T \\ 0 & t > T, \end{cases}$$

dove K è un intero positivo.

SOLUZIONE *[]Per applicare la formula al primo ordine dobbiamo valutare l'elemento di matrice* $\langle n| q^K |0\rangle$ *e la trasformata di Fourier*

$$\int_0^T \exp\{in\omega t\} \sin \omega' t \, dt \, .$$

Consideriamo in generale il problema di calcolare $\exp(\lambda q)\,|0\rangle$*; la componente di* λ^K *sarà il risultato voluto. Passando agli operatori di creazione e distruzione si trova*

$$q = i\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} (a - a^\dagger) \tag{10.11}$$

$$e^{\lambda q}\,|0\rangle = e^{i\mu(a-a^\dagger)}\,|0\rangle = e^{\frac{1}{2}\mu^2}\, e^{-i\mu a^\dagger}\, e^{i\mu a}\,|0\rangle \tag{10.12}$$

$$= e^{\frac{1}{2}\mu^2} \sum_{n\geq 0} \frac{(-i\mu)^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle \tag{10.13}$$

dove abbiamo posto $\mu \equiv \lambda(\hbar/2m\omega)^{1/2}$*. Estraendo il coefficiente di* μ^K *si trova*

$$q^K\,|0\rangle = K!\left(-i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\right)^K \sum_{m=0}^{[K/2]} \frac{(-)^m}{2^m m!\sqrt{(K-2m)!}}\,|K-2m\rangle$$

e sono pertanto possibili transizioni allo stato n *al primo ordine perturbativo con* $n = K, K-2, \ldots$*. Resta da valutare la componente di Fourier, che è data da un integrale elementare, e presenta un massimo pronunciato per la condizione di risonanza* $\omega' = n\omega$*.*

PROBLEMA 10.1-8 [] Risolvere il problema precedente nel caso che la perturbazione sia semplicemente $V = \sqrt{2\varepsilon}\, f(t)\, q$. Applicare la descrizione di Heisenberg per ottenere il risultato esatto.

SOLUZIONE *[]Nel caso di un Hamiltoniano rappresentato da una formula quadratica negli operatori canonici è sempre conveniente adottare la descrizione di Heisenberg che porta a equazioni lineari formalmente identiche a quelle di Hamilton per il corrispondente problema classico. Nel caso in questione si ha (introducendo unità in cui* $m = \hbar = \omega = 1$*):*

$$i\frac{da_H(t)}{dt} = [a_H(t), H(t)] = a_H(t) + \varepsilon f(t)$$

che ha come soluzione

$$a_H(t) = a\, e^{-it} + \varepsilon \int_0^t dt' f(t')\, e^{i(t'-t)} \, .$$

Dal momento che a $t = 0$ *lo stato soddisfa l'equazione* $a\,|\psi\rangle = 0$*, riesprimendo* a *in funzione si* $a_H(t)$ *si avrà anche*

$$(a_H(t) - \Lambda(t))\,|\psi\rangle = 0\,,$$

dove per semplicità di notazione si è posto $\Lambda(t) = \varepsilon \int_0^t dt' f(t')\, e^{i(t'-t)}$*. L'equazione precedente afferma che lo stato del sistema è uno* **stato coerente** *(vedi il §6.2.3) e pertanto la probabilità di trovare il sistema all'*n*–esimo livello*

dell'oscillatore armonico è semplicemente

$$P_{0\to n}(t) = \frac{|\Lambda|^{2n}}{n!}\exp(-|\Lambda(t)|^2)\,,$$

e cioè è rappresentata da una distribuzione di Poisson con $\langle n\rangle = |\Lambda|^2|$. *Si noti che questo valore medio coincide con* l'energia assorbita dall'oscillatore secondo la meccanica classica *(misurata in unità* $\hbar\omega$*).*

Nei precedenti problemi abbiamo considerato due esempi di **perturbazioni armoniche** , per le quali il potenziale $V(t)$ oscilla in modo sinusoidale con una frequenza ω fissata. Abbiamo cioè, in generale

$$V(t) = Be^{-i\omega t} + B^\dagger e^{i\omega t}$$

dove B è un fissato operatore nello spazio di Hilbert. Si tratta di un caso fisicamente molto rilevante e adatto ad approfondire l'analisi sulle perturbazioni dipendenti dal tempo.

Innanzitutto è bene chiarire che, se consideriamo la perturbazione armonica ristretta all'intervallo finito $(0, T)$, la corrispondente trasformata di Fourier non è affatto concentrata interamente sulla frequenza *nominale* ω. Infatti, applicando direttamente l'approssimazione al primo ordine in ε si ottiene, per $m \neq n$,

$$A_{n\to m}(T) = \langle m|\,B\,|n\rangle\,\frac{1-e^{i(\omega_{mn}-\omega)T}}{\hbar(\omega_{mn}-\omega)} + \langle m|\,B^\dagger\,|n\rangle\,\frac{1-e^{i(\omega_{mn}+\omega)T}}{\hbar(\omega_{mn}+\omega)}\,.$$

da dove si vede che la perturbazione può indurre transizioni anche tra stati con frequenze di Bohr ω_{mn} diverse dalla frequenza nominale ω. È tuttavia evidente che per grandi ωT la probabilità di transizione $|A_{n\to m}(T)|^2$ riceve il contributo dominante da una delle due regioni di **risonanza** $\omega_{mn} \pm \omega \simeq 0$. Assumendo $\omega > 0$, la condizione $\omega_{mn} \simeq \omega$ definisce il regime di **assorbimento risonante**, in cui il sistema fisico in questione assorbe energia dalla perturbazione esterna, compiendo una transizione ad uno stato finale $|m\rangle$ con energia E_m più alta di quella iniziale; nel caso opposto, vale a dire $\omega_{mn} \simeq -\omega$, si parla invece di **emissione risonante** di energia. Va comunque sottolineato che l'applicabilità del primo ordine perturbativo alla situazione di risonanza richiede che l'elemento di matrice $\langle m|\,B\,|n\rangle$, nel caso di assorbimento, o $\langle m|\,B^\dagger\,|n\rangle$, nel caso di emissione, siano particolarmente piccoli rispetto all'energia di risonanza $\hbar\omega$. L'analisi perturbativa dei problemi 10.1-8, e 10.1-9 che sono esattamente risolubili, può servire a chiarire questo punto.

PROBLEMA 10.1-9 [] Una particella di spin 1/2 è immersa in un campo magnetico statico ed uniforme B_0 diretto lungo l'asse z, per cui, in opportune unità, la Hamiltoniana imperturbata si scrive $H_0 = -B_0\sigma_z$. Si

consideri la perturbazione

$$\varepsilon V(t) = B_1(\sigma_x \cos\omega t + \sigma_y \sin\omega t)$$

corrispondente ad un campo magnetico rotante nel piano xy con velocità angolare ω. Si risolva il problema esattamente ed al primo ordine in teoria delle perturbazioni, prestando attenzione al fenomeno di risonanza.

Nel caso assorbimento risonante possiamo dunque trattenere solo il primo termine dell'ampiezza $A_{n\to m}(T)$, per cui si ottiene

$$|A_{n\to m}(T)|^2 = \frac{|\langle m|\, B\, |n\rangle|^2}{\hbar^2} f_T(\omega - \omega_{mn})$$

in termini della funzione di risonanza (vedi Fig. f10-1 a p. 375)

$$f_T(\omega) = \left[\frac{\sin\omega T/2}{\omega/2}\right]^2 .$$

Nel limite $T \to \infty$, la funzione $f_T(\omega)$ tende alla delta di Dirac

$$f_T(\omega) \simeq 2\pi T\delta(\omega) ,$$

il che ci permette (piuttosto formalmente) di definire la *probabilità di transizione per unità di tempo*

$$R = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}|A_{n\to m}(T)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle m|\, B\, |n\rangle|^2\, \delta(\hbar\omega - E_m + E_n) . \tag{10.14}$$

La natura formale di questa espressione, che vale zero per ogni ω, eccetto che per $\omega = \omega_{mn}$, dove diverge, è dovuta all'assunzione di uno spettro interamente discreto per l'energia del sistema. Consideriamo invece la transizione da un livello discreto iniziale E_i ad uno finale E_f che appartenga allo spettro continuo. In questo caso dovremo integrare l'espressione (10.14) sulla densità spettrale $n(E_f)$, dato che $n(E)\, dE$ rappresenta il numero di autostati dell'energia compresi nell'intervallo infinitesimo $(E, E + dE)$. Si ottiene così la celebrata **regola d'oro** di Fermi

$$R = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle f|\, B\, |i\rangle|^2\, n(E_f)$$

dove si intende che $E_f = E_i + \hbar\omega$.

Radiazione atomica. Una fondamentale applicazione di quanto appena visto si ottiene nel caso della radiazione elettromagnetica degli atomi. Se consideriamo energie $\hbar\omega$ di tipo atomico (eV piuttosto che MeV), possiamo restringere la nostra attenzione agli elettroni dell'atomo, trascurando gli effetti della perturbazione sul nucleo. Nel cap. 13 tratteremo in dettaglio il problema dell'interazione tra elettroni e campo e.m. nel

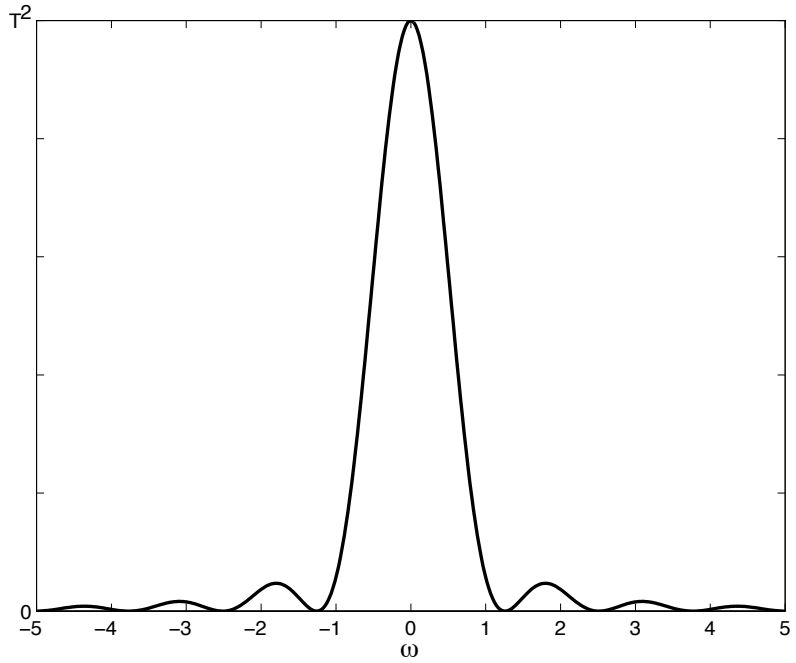


FIGURA 10-1. *La funzione* $f_T(\omega)$.

regime nonrelativistico; per il momento ci limitiamo alla cosidetta **approssimazione di dipolo**, che si basa sulle seguenti due considerazioni:

a) dato che la velocità elettronica v è nonrelativistica ed il campo magnetico ha la stessa ampiezza di quello elettrico nella radiazione, gli effetti magnetici sugli elettroni atomici sono più piccoli di quelli elettrici per un fattore v/c e possono essere in prima istanza trascurati;
b) la variazione del campo elettrico su distanze della scala atomica è trascurabile, dato che frequenze di tipo atomico corrispondono a lunghezze d'onda elettromagnetiche molto maggiori del raggio di Bohr.
Quindi possiamo considerare l'interazione di ciascun elettrone solo con un campo elettrico spazialmente uniforme $\mathbf{E}(t)$ e scrivere la Hamiltoniana

$$H = H_0 - \mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{d} \tag{10.15}$$

dove H_0 è lo Hamiltoniano imperturbato,

$$\mathbf{d} = -e \sum_j \mathbf{x}_j$$

è il **momento di dipolo elettrico** dell'atomo, $\mathbf{x}_j$ è l'operatore di posizione del j-esimo elettrone e $-e$ è la sua carica elettrica.

Consideriamo ora un'onda elettromagnetica monocromatica di frequenza ω, accesa solo nell'intervallo $(0, T)$, vale a dire

$$\mathbf{E}(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ \mathbf{E}_0 \cos \omega t & 0 < t < T \\ 0 & t > T, \end{cases}$$

Supponiamo inoltre che ω sia tale da indurre solo transizioni tra i livelli atomici discreti.

Osservazione *[] Come sappiamo, nel caso di transizioni tra livelli discreti la trattazione al primo ordine non è molto affidabile per grandi* ωT*, poichè la funzione di risonanza* $f_T(\omega)$*, non mediata da alcuna densità di stati, diventa singolare. Un'altra approssimazione, detta* dell'onda rotante*, risulta più efficace. Essa consiste nel ridurre il problema allo spazio di Hilbert bidimensionale relativo ai due livelli energetici* E_n *e* E_m*, trattando assorbimento ed emissione come processi indipendenti. Si pone perciò*

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_n & 0 \\ 0 & E_m \end{pmatrix}, \ \varepsilon V(t) = -\begin{pmatrix} 0 & \langle m| \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_0 |n\rangle e^{-i\omega t} \\ \langle n| \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_0 |m\rangle e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix}$$

Il problema è ora equivalente a quello della risonanza di spin 10.1-9 ed è esattamente risolubile.

L'ampiezza di transizione $A_{n\to m}(T)$ ha un comportamento piuttosto complicato in T nel caso di radiazione veramente monocromatica. Al contrario, nel caso di radiazione incoerente con una data dispersione in frequenza, la trattazione si semplifica e il primo ordine perturbativo risulta adeguato. Infatti l'incoerenza ci permette di sommare le probabilità di transizione piuttosto che le ampiezze (i termini di interferenza si mediano a zero), mentre la dispersione ci permette di integrare la funzione di risonanza $f_T(\omega)$, eliminando la singolarità per $T \to \infty$. Inoltre, se la radiazione non è polarizzata, possiamo mediare sulle direzioni del campo elettrico $\mathbf{E}_0$ e fare la sostituzione

$$|\langle m| \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_0 |n\rangle|^2 \longrightarrow \frac{1}{3} E_0^2 \, d_{mn}^2$$
$$E_0^2 = \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{E}_0 \,, \quad d_{mn}^2 = d_{nm}^2 = \langle n| \mathbf{d} |m\rangle \cdot \langle m| \mathbf{d} |n\rangle \ .$$

La quantità E_0^2 coincide con $2\pi u(\omega)$, dove $u(\omega)$ è il valor medio nel tempo della densità di energia per unità di frequenza contenuta nella radiazione. Infine, dall'espressione (10.14) e da quella valida per l'emissione risonante ($\omega \to -\omega$), si ricavano le probabilità per unità di tempo di assorbimento, $R_{n\to m}$, e di emissione, $R_{m\to n}$, di radiazione alla frequenza

$\omega_{mn} = \omega_m - \omega_n > 0$

$$R_{n\to m} = R_{m\to n} = \frac{4\pi^2}{3\hbar^2} u(\omega_{mn})\, d_{mn} \,. \tag{10.16}$$

L'uguaglianza $R_{n\to m} = R_{m\to n}$ è una verifica del *principio del bilancio dettagliato* (vedi 9.5.4) che discende dall'invarianza per inversione spazio--temporale dell'interazione elettromagnetica della materia.

Emissione spontanea. Secondo la trattazione appena presentata, un atomo in uno stato eccitato non decadrebbe mai in assenza di radiazione elettromagnetica esterna. In realtà, oltre al fenomeno di decadimento/emissione stimolato da campi esterni viene osservato anche quello di decadimento/emissione *spontaneo*. Questo significa che la stessa Hamiltoniana imperturbata H_0 nell'Eq. (10.15) non può avere i livelli atomici eccitati come autovalori esatti. In effetti, la forma di H_0 in termini di nucleo ed elettroni in interazione elettrostatica è già essa stessa un'approssimazione. In essa vengono trascurati tutti gli effetti relativistici, ma soprattutto viene ignorata la natura quantomeccanica dello stesso campo e.m.. Come avremo modo di apprezzare nel cap. 11, la cosiddetta *seconda quantizzazione* promuove il campo e.m. da c-numero a q-numero. In particolare il campo elettrico $\mathbf{E}$ ed il potenziale magnetico $\mathbf{A}$ ($\nabla \wedge \mathbf{A} = \mathbf{B}$ è il campo magnetico) sono osservabili canonicamente coniugate, per cui il principio di indeterminazione di Heisenberg proibisce lo stato in cui identicamente $\mathbf{E} = \mathbf{B} = 0$. Nello stato fondamentale, in assenza di materia carica, il campo e.m. fluttua attorno a $\mathbf{E} = \mathbf{B} = 0$, proprio come la posizione ed il momento del punto materiale quantomeccanico dell'oscillatore armonico fluttuano attorno al valore zero (vedi il §12.3). Queste fluttuazioni vengono comunemente denominate "fotoni virtuali" e sono sempre presenti, qualunque sia lo stato del campo e.m..

Dalle considerazioni precedenti segue che un sistema di particelle cariche (gli elettroni di un atomo, ad esempio) si trova comunque in interazione con il campo e.m., con il quale scambia costantemente fotoni virtuali. In termini matematici potremmo (approssimativamente) descrivere questa situazione includendo nella Hamiltoniana complessiva, oltre alla Hamiltoniana H_{at} del sistema atomico, anche la Hamiltoniana $H_{e.m.}$ del campo e.m. libero ed un termine di interazione H_{int}. Lo stato fondamentale dell'intero sistema, che per definizione è stabile, non differisce molto dal prodotto diretto dei due stati fondamentali, dell'atomo e del campo e.m. presi singolarmente (in altri termini H_{int} è una perturbazione piccola). Ma in ogni caso il prodotto diretto di uno stato atomico eccitato e dello stato fondamentale del campo e.m. non è un autostato

del sistema totale e può decadere nel prodotto di stati atomici meno energetici e stati eccitati del campo. Questi ultimi descrivono la radiazione emessa spontaneamente dall'atomo.

A questo punto della nostra trattazione, la tecnologia matematica necessaria per calcolare le rilevanti ampiezze di probabilità non è stata ancora sviluppata, nè lo sarà effettivamente nel prosieguo, dato che essa esula dagli scopi di questo libro (la teoria fondamentale per l'interazione tra materia e radiazione e.m. è una teoria relativistica e quantistica di campo, nota come **elettrodinamica quantistica** ; si vedano [**Sch64, BD64, IZ80, Kin90, Wei95**]). Ciononostante è possibile derivare importanti conclusioni sull'emissione spontanea fin d'ora, facendo ricorso al famoso argomento di Einstein del 1917, che si basa unicamente sull'idea di equilibrio statistico tra materia e radiazione e sul principio del bilancio dettagliato.

Consideriamo come modello quello ideale di **corpo nero** (vedi 5.1.1), costituito da una cavità risonante in cui la radiazione e.m. è in equilibrio con le pareti ad una temperaturà T. Gli atomi delle pareti assorbono ed emettono fotoni di continuo, in modo tale che il numero $N(j)$ di atomi nel livello atomico j resta costante nel tempo. Consideriamo le transizioni tra due generici livelli $E_m > E_n$, per le quali abbiamo calcolato le rilevanti probabilità di transizione stimolata per unità di tempo al precedente paragrafo (Eq. (10.16)). Evidentemente il numero di atomi che transiscono per unità di tempo da ω_m a ω_n è pari a $N(n)\,R_{n\to m}$, mentre per la transizione opposta tale numero vale $N(m)\,R_{m\to n}$. Se assumiamo che vi sia una probabilità nonnulla $\bar{R}_{m\to n}$ di emissione spontanea, l'equilibrio statistico richiede esattamente che

$$N(m)\,[R_{m\to n} + \bar{R}_{m\to n}] = N(n)\,R_{n\to m}\,.$$

Come sappiamo dalla (Eq. (10.16)), e comunque in base al principio del bilancio dettagliato, $R_{n\to m} = R_{m\to n}$. Inoltre $R_{n\to m}$ è proporzionale alla densità di energia $u(\omega_{mn})$ della radiazione con frequenza ω_{mn}, per cui otteniamo

$$u(\omega_{mn}) = \frac{3\hbar^2 N(m)\,\bar{R}_{m\to n}}{4\pi d_{mn}[N(n) - N(m)]}\,.$$

Ora è naturale assumere che all'equilibrio termico gli atomi siano distribuiti sui livelli in accordo con la distribuzione di Boltzmann, vale a dire $N(n)/N(m) = \exp[(E_m - E_n)/kT] = \exp(\beta\hbar\omega_{mn}/kT)$. Quindi

$$u(\omega_{mn}) = \frac{3\hbar^2}{4\pi d_{mn}}\,\frac{\bar{R}_{m\to n}}{\exp[(E_m - E_n)/kT] - 1}\,.$$

A parte per la normalizzazione, abbiamo ottenuto proprio la distribuzione di Planck per la radiazione del corpo nero! La normalizzazione differisce

solo per una combinazione di grandezze microscopiche di origine puramente quantomeccanica, che sono perciò indipendenti dalla temperatura. Quindi la normalizzazione risulta fissata già dal confronto con il limite classico della formula di Planck, cioè la formula di Rayleigh–Jeans (5.1). Si ottengono così sia il valore della probabilità di emissione spontanea per unità di tempo,

$$\bar{R}_{m\to n} = \frac{4\omega_{mn}^3 d_{mn}^2}{\hbar c^3} ,$$

sia la formula di Planck, Eq. (5.2).

10.2. Approssimazione semi-classica

Consideriamo ora un genere di approssimazione che va sotto il termine "semi-classica" o "WKB", dai nomi di Wentzel, Kramers e Brillouin a cui si deve il metodo[5]. Track 1

La questione alla base del metodo è la seguente: se i parametri fisici che compaiono nell'equazione di Schroedinger (masse, frequenze, scale di lunghezza) permettono di costruire una costante con le dimensioni di un'azione e se questa risulta molto grande rispetto alla costante di Planck dovremmo aspettarci che la fisica del problema sia descrivibile in termini di meccanica classica. Formalmente possiamo procedere trattando $\hbar$ come un parametro di sviluppo in termini del quale cercare la soluzione dell'equazione di Schroedinger sotto forma di sviluppo in serie di potenze. Consideriamo l'equazione in un solo grado di libertà

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi = E\psi$$

e poniamo

$$\psi(x) = \exp\{i\sigma(x)/\hbar\} .$$

Si ottiene così per la funzione $\sigma(x)$ un'equazione che, pur essendo equivalente a quella originale, si presta ad uno sviluppo in serie di potenze in $\hbar$:

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi}{dx^2} &= \frac{d}{dx}\left(\frac{i}{\hbar}\frac{d\sigma}{dx}\psi(x)\right)\\ &= \left(\frac{i}{\hbar}\frac{d\sigma(x)}{dx}\right)^2\psi(x) + \frac{i}{\hbar}\frac{d^2\sigma(x)}{dx^2}\psi(x)\\ &= \frac{2m}{\hbar^2}\left(V(x) - E\right) ,\end{aligned}$$

[5] Sarebbe giusto anche ricordare i nomi di Dirac e Feynman, nelle cui opere lo stretto legame tra meccanica classica e quantistica è illustrato al meglio.

da cui segue

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{d\sigma(x)}{dx}\right)^2 + V(x) - E = \frac{i\hbar}{2m}\frac{d^2\sigma(x)}{dx^2}\,.$$

Si pone ora $d\sigma(x)/dx = \phi_0(x) + \hbar\phi_1(x) + \ldots$:

$$\frac{1}{2m}\left(\sum_n \hbar^n \phi_n(x)\right) + V(x) - E = \sum_n \hbar^n \frac{d\phi_n(x)}{dx}\,.$$

Ordine per ordine in $\hbar$ si ottengono allora le relazioni di ricorrenza

$$\begin{aligned}
\phi_0^2 &= 2m(E - V(x)) \\
2\phi_0\phi_1 &= i\frac{d\phi_0}{dx} \\
2\phi_0\phi_2 + \phi_1^2 &= i\frac{d\phi_1}{dx} \\
&\ldots
\end{aligned}$$

La prima equazione ci dà subito

$$\phi_0(x) = p_\pm(E, x)$$

essendo $p = p_\pm(E, x)$ la funzione che esprime il *momento lineare* secondo la meccanica classica, con le due possibili determinazioni della radice quadrata. Le successive equazioni ci offrono poi

$$\begin{aligned}
\phi_1 &= \tfrac{1}{2} i \frac{p'}{p} \\
\phi_2 &= -\frac{p''}{4p^2} + \frac{3p'^2}{8p^3} \\
&\ldots
\end{aligned}$$

Limitandoci all'approssimazione più semplice, possiamo ora scrivere

$$\begin{aligned}
\psi(x) &\sim \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int \left(p\,dx + \tfrac{1}{2} i p'/p\right)\right\} \\
&= \frac{1}{\sqrt{p(E,x)}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int p(E,x)\,dx\right\}.
\end{aligned}$$

I due segni possibili per $p(E, x)$ ci permettono di scrivere la soluzione generale nella forma

$$\psi(x) \sim \frac{A_+}{\sqrt{p(E,x)}} \exp\left\{\int p(E,x)\,dx\right\} + \frac{A_-}{\sqrt{p(E,x)}} \exp\left\{-\int p(E,x)\,dx\right\}.$$

Per gli stati legati dobbiamo richiedere che la funzione d'onda sia reale, il che impone la scelta $A_- = \bar{A}_+$ e quindi

$$\psi_{wkb}(x) = \frac{A}{\sqrt{p(E,x)}} \sin\left(\int_0^x p(E,x')\,dx'/\hbar + \delta\right) .$$

L'approssimazione così ottenuta è nota come **approssimazione semi-classica** o *approssimazione WKB* (dalle iniziali di Wentzel, Kramers e Brillouin). La presenza di potenze negative di $p(E,x)$ rende singolare la soluzione approssimata in corrispondenza dei punti in cui $V(x) = E$, che corrispondono ai punti in cui il moto classico inverte la sua direzione. In generale l'approssimazione è accettabile se viene soddisfatto il principio secondo cui la variazione percentuale dell'energia cinetica classica sull'arco di una lunghezza d'onda di De Broglie deve essere molto piccola, il che ci dà

$$\lambda|dp/dx| \ll |p| \longrightarrow |p| \gg \left(2m\hbar\left|\frac{dV(x)}{dx}\right|\right)^{1/3}$$

e questo viene ovviamente a cadere in un intorno dei punti in cui $p(E,x) = 0$ (che corrispondono ai punti in cui il moto della particella classica inverte di segno). Dato che la validità dell'approssimazione è limitata a regioni sconnesse, sorge il problema di come raccordare tra loro questi "spezzoni" di soluzione. Ci sono vari modi per affrontare questo problema; senza pretendere di entrare troppo in dettaglio (si veda ad es.[**Kem37**] per un'ampia trattazione) una possibilità è quella di *invocare il principio che la funzione d'onda sia uniforme*: richiediamo cioè che dopo un giro lungo un cammino chiuso in campo complesso che contorni il taglio della funzione $p(E,x)$ la funzione torni alla stessa determinazione; tenendo conto del fatto che il fattore $\sqrt{p}$ cambia segno, ciò comporta

$$\Delta\left(\int_0^x p(E,x')\,dx'\right)/\hbar = (2n+1)\pi$$

che ci porta alla condizione di Bohr-Sommerfeld

$$\oint p(E,x)\,dx = 2\pi\hbar\,(n+\tfrac{1}{2}),\ n \in \mathbb{N} .$$

Un argomento più diretto si fonda sull'analisi della soluzione nell'intorno dei punti in cui $p(E,x) = 0$. Sia $x = a$ un punto di inversione classica del moto. Se approssimiamo il potenziale intorno ad a con il suo sviluppo di Taylor otteniamo

$$\psi(x) \sim \begin{cases} \dfrac{A}{(x-a)^{1/4}} \sin\left(\sqrt{2mV'(a)}\,\tfrac{2}{3}(x-a)^{3/2}/\hbar + \delta\right) & x > a \\ \dfrac{A'}{(a-x)^{1/4}} \exp\left\{-\sqrt{2mV'(a)}\tfrac{2}{3}(a-x)^{3/2}/\hbar\right\} & x < a . \end{cases}$$

Ma la soluzione per un potenziale lineare è nota dal §6.1.2 in termini delle funzioni di Airy. Tenendo conto della rappresentazione asintotica dell'Eq. (6.6), si deduce che il raccordo continuo si ha per $\delta = \pi/4$ e $A' = A/2$. Si hanno perciò le *formule di connessione*

$$|p|^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\int_x^a |p(E,x')|\,dx'/\hbar\right\} \hookrightarrow 2p^{-\frac{1}{2}} \cos\left(\int_a^x p(E,x')\,dx'/\hbar - \frac{\pi}{4}\right)$$

e, in modo analogo, nel secondo punto di inversione classica del moto ($x = b$) valgono le formule di connessione

$$2p^{-\frac{1}{2}} \cos\left(\int_x^b p(E,x')\,dx'/\hbar - \frac{\pi}{4}\right) \hookleftarrow |p|^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\int_b^x |p(E,x')|\,dx'/\hbar\right\}$$

(per la derivazione completa delle formule di connessione si veda [**Mer61**]). Riportiamo senza dimostrazione le due formule di connessione per la seconda soluzione indipendente, che ci saranno utili nel seguito:

$$|p|^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{\int_x^a |p(E,x')|\,dx'/\hbar\right\} \hookleftarrow -p^{-\frac{1}{2}} \sin\left(\int_a^x p(E,x')\,dx'/\hbar - \frac{\pi}{4}\right)$$
$$-p^{-\frac{1}{2}} \sin\left(\int_x^b p(E,x')\,dx'/\hbar - \frac{\pi}{4}\right) \hookrightarrow |p|^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{\int_b^x |p(E,x')|\,dx'/\hbar\right\}.$$

Dalle formule precedenti troviamo che la soluzione a quadrato sommabile esiste se le due rappresentazioni

$$\pm\cos\left(\int_x^b p(E,x')\,dx'/\hbar - \frac{\pi}{4}\right)$$
$$\pm\cos\left(\int_a^x p(E,x')\,dx'/\hbar - \frac{\pi}{4}\right)$$

si raccordano nella zona centrale, il che avviene se

$$\int_x^b p(E,x')\,dx'/\hbar - \frac{\pi}{4} + \int_a^x p(E,x')\,dx'/\hbar - \frac{\pi}{4} = n\pi,$$

che è di nuovo la condizione di Bohr-Sommerfeld.

PROBLEMA 10.2-10 []Applicando le formule di connessione ottenere la seguente approssimazione per i coefficienti di riflessione e trasmissione sotto una barriera di potenziale:

$$R = (\tanh\lambda)^2,\ T = (\cosh\lambda)^{-2},$$

dove $\lambda = \int_a^b |p(E,x)|\,dx/\hbar + \log 2$. L'integrale si estende a tutta la regione classicamente inaccessibile $E < V(x)$. Notare che l'approssimazione è buona solo quando l'effetto tunnel è piccolo, nel qual caso si ha semplicemente $T \sim \exp\{-2\int_a^b \sqrt{2m(V(x)-E)}\,dx/\hbar\}$.

10.3. Metodo variazionale

Sappiamo che le equazioni della fisica matematica sono deducibili da un principio variazionale. Ad esempio l'equazione di Helmholtz dell'ottica (5.16) è deducibile dal principio di stazionarietà Track 1

$$\delta \int \left(|\nabla u(\mathbf{x})|^2 - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 u(\mathbf{x})^2 \right) d^3x = 0 \,.$$

Per l'equazione di Schroedinger stazionaria, con autovalore E, si trova analogamente il principio variazionale

$$\delta \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi(\mathbf{x})|^2 + [V(\mathbf{x}) - E]\, |\psi(\mathbf{x})|^2 \right) d^3x = 0 \,, \tag{10.17}$$

come si trova già nel primo lavoro di Schroedinger [**Sch26**]. Questo principio è alla base di un metodo di calcolo approssimato (il *metodo variazionale*) con vaste applicazioni a tutta la meccanica quantistica, in modo particolare alla fisica degli atomi a più elettroni e a quella delle molecole.

10.3.1. Il metodo di Ritz. Nel principio variazionale di Schroedinger (10.17) l'autovalore E è da interpretare come parametro di Lagrange associato al vincolo $\int |\psi|^2 \, d^3x = 1$ e quindi il principio variazionale si può riformulare nella forma:

$$\delta \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = 0 \,,$$

dove H è l'Hamiltoniano. Sotto questa forma il principio variazionale è di validità universale. Il valore minimo del funzionale $\mathcal{H}[\psi] = \langle \psi | H | \psi \rangle / \|\psi\|^2$ coincide con lo stato fondamentale, mentre gli autovalori superiori rappresentano valori "critici" di $\mathcal{H}$, cioè punti di stazionarietà del tipo punto a sella. Per verificare questa affermazione è sufficiente fare uso della rappresentazione spettrale che ci permette di esprimere il funzionale $\mathcal{H}[\psi]$ come una forma quadratica nei coefficienti di sviluppo di ψ sulla base degli autovettori: scelto un qualunque autovalore E_m e detti $c_n = \langle n | \psi \rangle$ i coefficienti dello sviluppo del vettore di stato sulla base dell'energia, si ha

$$\mathcal{H}[\psi] = \frac{\sum_n E_n |c_n|^2}{\sum_n |c_n|^2} = E_m + \frac{\sum_n (E_n - E_m)\, |c_n|^2}{\sum_n |c_n|^2} \,.$$

Nel caso dello stato fondamentale la frazione sulla destra della precedente equazione è sempre positiva e quindi siamo in presenza del minimo assoluto; per i livelli superiori la frazione può essere di segno qualunque, ma per $c_n = \delta_{nm} + \varepsilon \nu_n$ *risulta quadratica in* ε *e quindi stazionaria rispetto a variazioni di* ψ.

In questa forma ovviamente il principio variazionale è del tutto equivalente all'equazione di Schroedinger. Esso si può mettere a frutto come metodo di calcolo approssimato se si circoscrive il dominio di variabilità

del vettore ψ. Sia ad esempio Σ_N un sottospazio N-dimensionale dello spazio di Hilbert: per lo stato fondamentale avremo

$$E_0 = \min_{\psi} \mathcal{H}[\psi] \leq \min_{\psi \in \Sigma_N} \mathcal{H}[\psi] \,.$$

Otterremo perciò una stima per eccesso (una maggiorazione) dello stato fondamentale risolvendo un problema variazionale *finito-dimensionale*, ossia diagonalizzando una matrice $N \times N$. La scelta del sottospazio costituisce il punto cruciale del metodo. In genere conviene definire un sottospazio dipendente da un certo numero di parametri rispetto a cui si cercherà di soddisfare la condizione di stazionarietà. In realtà il metodo permette di ottenere una stima anche dei livelli superiori: se si è interessati al k-esimo autovalore si sceglieranno sottospazi di dimensione $N \geq k$ (metodo di Ritz, vedi [**Kem37**]).

PROBLEMA 10.3-11 []Determinare lo spettro dell'Hamiltoniano

$$H = \tfrac{1}{2}(p^2 + q^2) + \lambda q^4 \,,$$

applicando il metodo variazionale.

SOLUZIONE *[]Scegliamo come sottospazio quello generato dai primi* N *autovettori* con numero quantico pari *di un oscillatore armonico con frequenza* ω*; la scelta della parità definita è suggerita dal fatto che l'Hamiltoniano commuta con la parità e questo permette di ridurre il problema agli autovalori nei due sottospazi rispettivamente pari e dispari. Variando rispetto a* ω *cercheremo la migliore approssimazione per lo stato fondamentale. Fissiamo ad esempio* $N = 1$*. Il calcolo si riduce allora a trovare il minimo rispetto ad* ω *del valore d'aspettazione*

$$\langle 0|\, H \,|0\rangle = \tfrac{1}{4}(\omega + \omega^{-1}) + \tfrac{3}{4}\lambda\omega^{-2} \,,$$

e quindi

$$1 - \omega^{-2} - 6\lambda\omega^{-3} = 0 \,.$$

La Fig. 10-2 a p. 385 riporta il valore di $\langle 0|\, H \,|0\rangle$ *(*$N = 1$*, linea più marcata); diagonalizzando la matrice finita che si ottiene per* $N = 2, 3, 4$ *si hanno le approssimazioni via via migliori riportate in figura. Il calcolo per* $N \geq 2$ *offre poi una stima variazionale del terzo autovalore e così via. Lavorando con un sottospazio costituito da funzioni dispari si hanno poi le stime per il secondo livello, il quarto etc. Si noti che nel limite* $N \to \infty$ *lo spettro della matrice di* H *ristretta al sottospazio* $N \times N$ diventa indipendente da ω*: questa tendenza si palesa nell'appiattirsi delle curve a partire da* $N \geq 3$*. (Il calcolo si effettua in pochi secondi anche su un personal computer; si veda la Tab. 10-3).*

PROBLEMA 10.3-12 [] Valutare l'energia dello stato fondamentale dell'atomo di idrogeno attraverso un calcolo variazionale utilizzando funzioni di prova a) $\psi = \mathcal{N} \exp\{-ar\}$, b) $\psi = \mathcal{N} \exp\{-r^2/4\sigma\}$. Quest'ultimo calcolo spiega come mai l'argomento errato del Probl. 5.4-17 porta a un valore *più alto* per il livello fondamentale.

λ	N = 1	N = 2	N=5	Esatto [**HM75**]
Stato fondamentale				
.01	.507288	.507257	.5072562	0.50725620
0.1	.560308	.559186	.5591463	0.55914633
0.5	.701662	.698251	.6961776	0.69617582
1.0	.812500	.807415	.8037831	0.80377065
Primo livello eccitato				
.01	1.535799	1.535651	1.5356483	1.53564828
0.1	1.773402	1.769673	1.7695027	1.76950264
0.5	2.339127	2.329442	2.3244221	2.32440635
1.0	2.812500	2.746050	2.7379228	2.73789227

TABELLA 10-3. *Calcolo variazionale dello stato fondamentale e del primo stato eccitato per l'oscillatore anarmonico.*

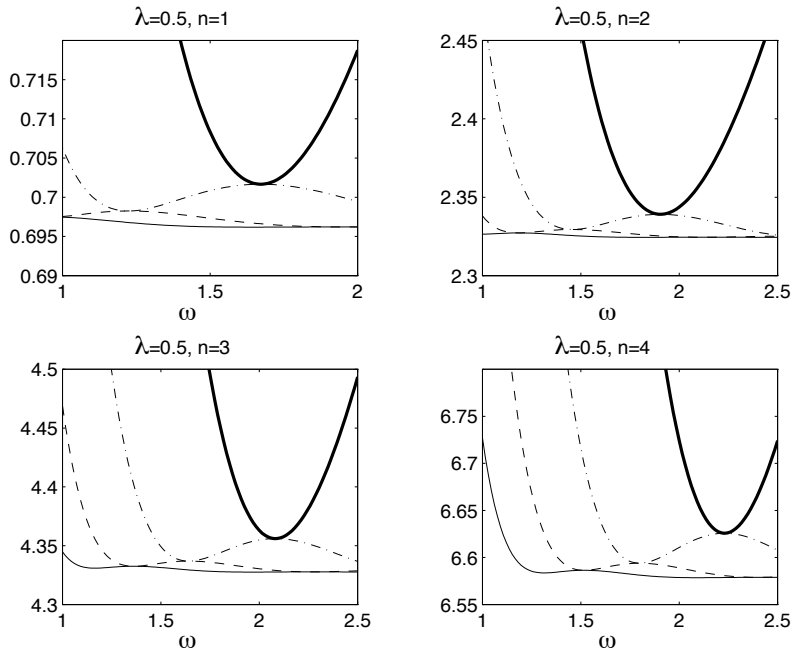


FIGURA 10-2. *Metodo variazionale applicato all'oscillatore anarmonico.*

PROBLEMA 10.3-13 []Valutare lo stato fondamentale dell'atomo di elio

applicando il metodo variazionale e scegliendo come sottospazio la funzione di prova dei due elettroni data dal prodotto di due funzioni idrogenoidi (lasciando la carica del nucleo come parametro rispetto a cui ottimizzare).

SOLUZIONE *[]Lo stato fondamentale si ottiene per spin totale zero che corrisponde ad una funzione di spin antisimmetrica e quindi funzione orbitale simmetrica. Si pone perciò*

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = u_{100}(r_1)\, u_{100}(r_2)\,,$$

dove le funzioni u_{nlm} *sono definite nel §6.6. Si lascia il parametro* a *(raggio di Bohr) come parametro variazionale e si cerca il minimo del valore di aspettazione dell'Hamiltoniano*

$$H = \frac{1}{2\mu}\left(\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2\right) - 2e^2/r_1 - 2e^2/r_2 + e^2/|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|\,.$$

Per i dettagli del calcolo si vedano ad esempio [**Mes62, CCP84, Sak90**].

Track 2

10.3.2. Disuguaglianza di BBL. *Il metodo variazionale fornisce sempre un limite superiore al valore dell'energia; il principale difetto del metodo consiste nell'assenza di una stima dell'errore. A questo può ovviare un risultato di Barnes, Brascamp e Lieb* [**LSW76**] *che fornisce un limite* inferiore *per lo stato fondamentale. Il risultato è formulato in termini di un confronto tra la* funzione di partizione *classica e quella quantistica. Enunciamo il risultato senza darne la dimostrazione, che richiederebbe gli strumenti dell'analisi funzionale.*

Sia $H = -\triangle + V(\mathbf{x})$ *l'Hamiltoniano per una particella scalare neutra in un campo di forze statico; sia* n *la dimensione dello spazio. Si assume che l'integrale (funzione di partizione classica)*

$$I(\beta) \equiv \int d^n x\, \exp\{-\beta V(\mathbf{x})\}$$

sia convergente per ogni β*; sia inoltre*

$$Z(\beta) = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H} \equiv \sum_k \langle k|\, e^{-\beta H}\, |k\rangle\ ,$$

che rappresenta la funzione di partizione quantistica. Vale allora la disuguaglianza

$$Z(\beta) \le [2\sinh\beta\omega]^{-n}[I(\alpha)(\omega^2\alpha/\pi)^{n/2}]^{\beta/\alpha}\,,$$

dove ω *è un qualunque numero positivo e*

$$\alpha^{-1} = \omega\coth\beta\omega\ .$$

Una conseguenza interessante si ottiene al limite $\beta \to \infty$*, tenendo conto del fatto che lo stato fondamentale* E_0 *è legato alla* $Z(\beta)$ *dalla relazione*

$$E_0 = -\lim_{\beta\to\infty} \beta^{-1}\, \log Z(\beta)\ .$$

Si trova precisamente

$$E_0 \geq \max_{\omega>0} \omega \left[n + \tfrac{1}{2} n \log(\pi/\omega) - \log I(\omega^{-1}) \right] ,$$

che costituisce un principio variazionale complementare *a quello di Ritz. Si noti che dalla disuguaglianza di BBL si ottiene come caso particolare (per* $\omega \to 0$*)*

$$Z(\beta) \leq (4\pi\beta)^{-\frac{1}{2}n} \int d^n x \, \exp\{-\beta V(x)\} ,$$

nota come disuguaglianza di Golden-Thompson-Symanzik [**Gol65, Tho65, Sym65**].

PROBLEMA 10.3-14 []Ricavare un limite inferiore allo stato fondamentale dell'oscillatore anarmonico applicando la disuguaglianza di BBL.

10.4. Approssimazione adiabatica

Consideriamo un sistema quantistico (con spettro discreto) che a causa della interazione con l'ambiente sia descritto da un Hamiltoniano dipendente dal tempo[6]. Come sappiamo in questo caso l'operatore di evoluzione temporale è dato dall'esponenziale cronologicamente ordinato e perciò non è possibile utilizzare la teoria spettrale. Tuttavia se la dipendenza dal tempo dell'Hamiltoniano è continua e sufficientemente lenta, in un senso da precisare, risulta possibile applicare l'**approssimazione adiabatica** secondo cui se lo stato al tempo $t = 0$ è autostato di $H(0)$ con autovalore $E(0)$, allora lo stato al tempo t è dato dall'autostato di $H(t)$ appartenente all'autovalore $E(t)$ che risulta connesso con continuità a $E(0)$. Ad esempio se $H(t)$ è dato da un oscillatore armonico con frequenza $\omega(\varepsilon t)$ e il sistema si trova inizialmente nello stato fondamentale, l'approssimazione adiabatica consiste nell'identificare $|\psi(t)\rangle$ con lo stato fondamentale corrispondente alla frequenza $\omega(t)$. L'idea dell'approssimazione è perciò che il *numero quantico* rimane costante nel tempo se la variazione di H è lenta. La prima dimostrazione del **teorema adiabatico** per l'equazione di Schroedinger risale a Fermi e Persico [**FP26**]. Vediamo come si può affrontare il problema applicando quanto già sappiamo dalla teoria delle perturbazioni. Indichiamo con $|E(t)\rangle$ un generico autovettore $H(t)\,|E(t)\rangle = E(t)\,|E(t)\rangle$, che assumeremo non degenere per ogni t; è necessario scegliere una convenzione per la fase dei vettori $|E(t)\rangle$, in quanto l'equazione agli autovalori fissa soltanto il raggio. Conveniamo di fissare la fase in modo tale che Track 1

$$\langle E(t)| \frac{d}{dt} |E(t)\rangle = 0 . \tag{10.18}$$

[6] Per semplicità di notazione porremo $\hbar = 1$ fino alla fine del capitolo.

Ciò può essere esplicitato ricorrendo alla teoria delle perturbazioni stazionarie; applichiamo le formule del §10.1.1, considerando $H(t+\varepsilon) = H(t) + \varepsilon\dot{H}(t)$:

$$|E(t+\varepsilon)\rangle = |E(t)\rangle + \varepsilon R_{E(t)}\dot{H}(t)\,|E(t)\rangle + O(\varepsilon^2)\ ,$$

dove R è l'operatore risolvente

$$R_{E(t)} = \Pi(E(t) - H(t))^{-1}\Pi\,,\ \Pi = \mathbb{1} - |E(t)\rangle\langle E(t)|\ .$$

Con questa convenzione vale perciò la relazione

$$\frac{d}{dt}|E(t)\rangle = R_{E(t)}\dot{H}(t)\,|E(t)\rangle\ .$$

Consideriamo ora lo sviluppo della soluzione $|\psi(t)\rangle$ sulla base degli autovettori istantanei dell'Hamiltoniano ; i coefficienti dello sviluppo saranno funzioni del tempo, in quanto i vettori $|E_n(t)\rangle$ *non sono soluzioni* dell'equazione di Schroedinger. Abbiamo perciò

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t)\,|E_n(t)\rangle\ ,$$

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \sum_n \dot{a}_n(t)\,|E_n(t)\rangle + \sum_n a_n(t)\,R_{E_n(t)}\dot{H}(t)\,|E_n(t)\rangle\ .$$

Inseriamo quest'ultima relazione nell'equazione di Schroedinger e otteniamo il sistema differenziale (per alleggerire la notazione, poniamo $\hbar = 1$)

$$\dot{a}_n(t) = -i\,E_n(t)\,a_n(t) + \sum_{k\neq n}\frac{\langle E_n(t)|\,\dot{H}(t)\,|E_k(t)\rangle}{E_n(t) - E_k(t)}\,a_k(t)\ .$$

Il sistema è equivalente all'equazione di Schroedinger ma si presta ora ad applicare l'approssimazione adiabatica nel caso in cui la variazione di $H(t)$ sia lenta: dal sistema si vede chiaramente qual è la condizione precisa: gli elementi di matrice di $\dot{H}$ devono essere molto piccoli *rispetto alle corrispondenti frequenze di Bohr*. In questa situazione potremo applicare la teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo considerando come parametro di sviluppo il parametro di scala temporale che compare necessariamente nella dipendenza di H da t. Conviene introdurre nuovi coefficienti definiti da

$$A_n(t) = a_n(t)\,\exp\left\{i\int_0^t d\tau E_n(\tau)\right\}\ ,$$

in termini dei quali il sistema si riduce al seguente

$$\dot{A}_n(t) = \sum_k{}' \frac{\langle E_n(t)|\,\dot{H}(t)\,|E_k(t)\rangle}{\omega_{nk}(t)}\,\exp\left\{-i\int_0^t d\tau\,\omega_{nk}(t)\right\}A_k(t)\,,$$

dove $\omega_{nk} = E_n(t) - E_k(t)$ (frequenze di Bohr). Ora dobbiamo immaginare una situazione in cui il sistema passa dall'Hamiltoniano H_1 all'Hamiltoniano H_2 in un tempo T (ad es. $H(t) = tH_1/T + (T-t)H_2/T$) e si rende il processo adiabatico prendendo T molto grande rispetto ai periodi ω_{nk}^{-1}. Poniamo perciò $\langle E_n(t)|\dot{H}(t)|E_k(t)\rangle = \delta H_{nk}/T$ e riscriviamo il sistema nella forma

$$\dot{A}_n(t) = \frac{1}{T}\sum_k{}' \lambda_{nk}(t/T)\,\omega_{nk}(t)\,\exp\left\{-i\int_0^t d\tau\,\omega_{nk}(t)\right\} A_k(t)\,,$$

dove abbiamo introdotto $\lambda_{nk} = \delta H_{nk}/\omega_{nk}^2$ e per semplicità abbiamo assunto che la dipendenza dal tempo, come quella di $H(t)$, sia solo attraverso il rapporto t/T. Supponiamo inoltre che all'istante iniziale lo stato del sistema sia un autostato dell'Hamiltoniano $A_n(0) = \delta_{n\bar{n}}$. Integriamo l'equazione per $A_{\bar{n}}(t)$ così da ottenere

$$A_{\bar{n}}(T) = 1 + \frac{1}{T}\int_0^T dt\,\sum_k{}' \lambda_{\bar{n}k}(t/T)\,\omega_{\bar{n}k}(t)\,\exp\{-i\int_0^t d\tau\,\omega_{\bar{n}k}(t)\}\,A_k(t)\,.$$

Integrando per parti troviamo poi

$$\begin{aligned} A_{\bar{n}}(T) = 1 &+ \frac{1}{T}\sum_k{}' \left(\lambda_{\bar{n}k}(1)A_k(1)\,e^{-i\int_0^T \omega_{\bar{n}k}\,dt}\right) \\ &- \frac{1}{T}\sum_k{}' \int_0^T dt\,e^{-i\int_0^t \omega_{\bar{n}k}\,dt'}\,\frac{d}{dt}\left(\lambda_{\bar{n}k}(t/T)\,A_k(t')\right) \end{aligned}$$

Si riconosce a questo punto che $A_{\bar{n}}(T)$ differisce da uno per termini che sono tutti di ordine $O(1/T)$ e quindi nel limite di una variazione infinitamente lenta dell'Hamiltoniano lo stato rimane istante per istante un autovettore dell'Hamiltoniano. È essenziale l'assunzione che le frequenze di Bohr rimangano in tutto l'intervallo $(0,T)$ diverse da zero e precisamente $|\omega_{nk}| > \Omega > 0$. Si vedano [**Bat61, Mes62**] per ulteriori dettagli.

PROBLEMA 10.4-15 []Considerare l'Hamiltoniano dipendente dal tempo

$$H = \tfrac{1}{2}p^2 + l(t)^{-2}\,U(q/l(t))\,.$$

Dimostrare che attraverso le sostituzioni

$$\begin{aligned} x &= l(t)\,\xi \\ \tau &= \int_0^t dt'\,l(t')^{-2} \\ \psi(x,t) &= l(t)^{-\frac{1}{2}}\,\exp\left\{\tfrac{1}{2}i\frac{\dot{l}(t)}{l(t)}x^2\right\}\phi(\xi,\tau)\,, \end{aligned}$$

l'equazione di evoluzione per la ϕ è data da

$$i\frac{\partial\phi}{\partial\tau} = -\tfrac{1}{2}\frac{\partial^2\phi}{\partial\xi^2} + U(\xi)\,\phi + \tfrac{1}{2}l^3\ddot{l}\,\xi^2\phi\,.$$

Assumendo $l(t)$ lentamente variabile, si mostri la validità dell'approssimazione adiabatica.

10.4.1. La fase di Berry. *La convenzione che abbiamo adottato per definire le fasi degli autostati istantanei dell'Hamiltoniano* $H(t)$ *non è ovviamente una scelta obbligata. Una qualunque altra definizione è del tutto lecita ed equivalente dal punto di vista fisico. Supponiamo che l'Hamiltoniano dipenda dal tempo attraverso un insieme di parametri fisici* $\mathbf{R}(t) = (R_1(t), \ldots, R_s(t))$. *Parametrizziamo gli autostati di* $H(t)$ *in termini di* $\mathbf{R}$. *L'approssimazione adiabatica per uno stato iniziale* $|n, \mathbf{R}(0)\rangle$ *sarà data da*

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left\{-i \int_0^t dt' \, E_n(t') + i\gamma(t)\right\} |n, \mathbf{R}(t)\rangle \ ,$$

dove la fase $\gamma(t)$ *è fissata in base all'equazione di Schroedinger:*

$$\dot{\gamma}(t) = i \langle n, \mathbf{R}(t)| \frac{d}{dt} |n, \mathbf{R}(t)\rangle = i \langle n, \mathbf{R}(t)| \nabla_{\mathbf{R}} |n, \mathbf{R}(t)\rangle \cdot \dot{\mathbf{R}}(t) \ .$$

La convenzione adottata finora corrisponde a $\gamma = 0$ *ed è stata utilizzata per quasi sessant'anni fino al lavoro di Berry* [**Ber84**] *in cui si è mostrato che in generale questa convenzione viene a cadere per il caso in cui il cammino nello spazio dei parametri è chiuso. Quello che succede è che, seppure istante per istante sia possibile mantenere la condizione* (10.18), il vettore a cui si arriva dopo un cammino chiuso è sfasato rispetto a quello di partenza*: lo sfasamento dipende solo dal cammino nello spazio dei parametri e non dalla legge oraria di percorrenza lungo questo cammino. Per questo motivo la fase di Berry è nota come* fase geometrica, *mentre il contributo alla fase che coinvolge* $E_n(t)$ *è detta* fase dinamica. *Si veda* [**SW89**] *per un vasto panorama di applicazioni.*

L'esistenza dello sfasamento è di per sé ininfluente per l'approssimazione adiabatica in quanto tale, ha però interessanti implicazioni in meccanica molecolare, nell'ambito dell'approssimazione di Born-Oppenheimer.

PROBLEMA 10.4-16 []Si studi l'evoluzione temporale per il sistema quantistico definito dall'Hamiltoniano

$$H(t) = (a^\dagger - c(t))(a - \bar{c}(t)) \, ,$$

dove a, $a^\dagger$ sono gli operatori di creazione-distruzione e $c(t)$ è una funzione differenziabile del tempo. Risolvere il problema esattamente e in approssimazione adiabatica e identificare la fase di Berry.

SOLUZIONE *[]Si veda* [**GO89**].

CAPITOLO 11

Particelle identiche

11.1. Il principio di indistinguibilità

Le molecole di un fluido, gli elettroni di un atomo, gli elettroni di conduzione di un metallo, i protoni di un nucleo atomico, sono tutti esempi concreti di ciò che comunemente si intende per sistemi di particelle identiche. Due o più particelle sono identiche qualora esse posseggano identiche caratteristiche cinematiche (stessa massa inerziale, stessi vincoli cinematici etc.) ed identiche proprietà dinamiche (stessa carica elettrica, stesso momento magnetico, in generale stesso comportamento in un fissato campo esterno). In sostanza, nell'ipotesi consueta che il sistema in questione ammetta una descrizione hamiltoniana, risulta naturale considerare identiche particelle la cui Hamiltoniana è invariante sotto una qualunque permutazione degli indici associati a ciascuna particella. Un esempio immediato è fornito dal sistema di N punti materiali con uguale massa descritto dalla Hamiltoniana Track 1

$$H = \frac{1}{2m}\sum_{j=1}^{N} \mathbf{p}_j^2 + \sum_{j<k} V(|\mathbf{q}_j - \mathbf{q}_k|) \ .$$

Si noti che anche gli atomi di un reticolo cristallino, o di un opportuno sottoinsieme dello stesso, sono "particelle identiche" nel senso appena specificato. E tuttavia un solido (cristallino e non) non può essere assimilato agli esempi precedenti, anche se la Hamiltoniana resta invariante permutando gli indici delle particelle: a causa della dinamica stessa del sistema, lontano dal punto di fusione gli atomi compiono solo piccole oscillazioni attorno a ben precise posizioni di equilibrio, il che rende gli atomi stessi naturalmente distinguibili[1]. Ritorneremo più avanti su questo punto sottile.

Vogliamo ora confrontare la descrizione classica e quella quantomeccanica per un sistema di particelle identiche. Per semplificare inizialmente il discorso, consideriamo il caso di un sistema costituito solo da due particelle identiche (per esempio i due elettroni dell'atomo di elio o della molecola

[1] D'altra parte molte delle proprietà fisiche osservabili di un solido siano di fatto descrivibili in termini di un vero e proprio gas di particelle "elementari" identiche: i **fononi**, cioè i quanti dei modi normali di oscillazione del reticolo [**FR95**].

di idrogeno). Ad un dato, arbitrario istante, supponiamo di localizzare esattamente i due elettroni. Questo è per definizione sempre possibile secondo la meccanica classica, ma non presenta impedimenti di principio neppure dal punto di vista quantomeccanico (almeno nell'approssimazione nonrelativistica alla quale qui ci restringiamo), dato che i due operatori di posizione $\mathbf{q}_1$ e $\mathbf{q}_2$ commutano. Siano $\mathbf{x}_1$ e $\mathbf{x}_2$ le posizioni così determinate, diciamo all'istante $t = t_0$. Nel caso di due elettroni sappiamo però che questo non basta a definire interamente lo stato quantomeccanico, in quanto ciascun elettrone possiede ulteriori gradi di libertà rappresentati dallo spin. Possiamo in prima battuta non preoccuparcene, assumendo che i due spin elettronici siano parelleli. Ancor più semplicemente possiamo considerare due particelle prive di spin, come due mesoni π^0 o come due atomi di idrogeno entrambi nello stato fondamentale, ecc.

Abbiamo dunque, per ipotesi, nella descrizione classica

$$\mathbf{q}_j(t_0) = \mathbf{x}_j\,, \quad j = 1,2\,, \tag{11.1}$$

dove $\mathbf{q}_1(t)$ e $\mathbf{q}_2(t)$ sono le traiettorie del moto. Le condizioni iniziali (11.1) sono compatibili con l'assegnazione anche di arbitrarie velocità per le due particelle, dato che le equazioni del moto lagrangiane sono del secondo ordine nelle derivate temporali. Al tempo stesso questo significa che lo stato classico del sistema è completamente determinato dai valori iniziali $\mathbf{x}_j$ e $m\mathbf{v}_j \equiv \mathbf{p}_j(t_0)$, $j = 1,2$. Infatti le stesse equazioni del moto fissano univocamente $\mathbf{q}_j(t)$ e $\mathbf{p}_j(t)$ per tutti gli altri valori di t. Risulta allora evidente che nella descrizione della meccanica classica, le due particelle, seppure identiche, sono perfettamente *distinguibili*: la particella permanentemente identificata dall'indice j ($j = 1,2$) è quella che al tempo $t = t_0$ si trovava nel punto $\mathbf{x}_j$ con velocità $\mathbf{v}_j$ (il caso patologico $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2$, $\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_2$ va ovviamente escluso). È l'unicità delle traiettorie classiche che garantisce che questa assegnazione di un indice distintivo per ciascuna delle due particelle si mantiene del tutto consistente ad ogni istante t successivo (e precedente[2]) a t_0.

[2]Non vi sono ostacoli ad estendere questa analisi ad un numero arbitrario N di particelle identiche che ubbidiscano alla meccanica classica. Queste formano quindi un sistema di particelle distinguibili. Quando però N diventa macroscopicamente grande, rendendo obbligatoria una descrizione solo statistica del sistema, la suddetta distinguibilità deve venir meno, proprio perché non è più possibile determinare tutte le posizioni e le velocià iniziali. Insistendo comunque sulla distinguibilità, si va incontro al paradosso di Gibbs sull'entropia di mescolamento. D'altro canto, questo paradosso si evita adottando la cosiddetta statistica di Maxwell-Boltzmann per particelle classiche *indistinguibili*, che coincide con il limite classico ($\hbar \to 0$, e/o $T \to \infty$) delle statistiche quantistiche di Bose-Einstein e Fermi-Dirac (vedi [**FR95**]).

Esaminiamo ora la descrizione quantomeccanica del moto delle due particelle identiche. L'equivalente quantomeccanico dell'Eq. (11.1) si scrive naturalmente

$$\mathbf{q}_j\,|\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2\rangle = \mathbf{x}_j\,|\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2\rangle\ , \quad j = 1,2\ , \tag{11.2}$$

dove $|\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2\rangle$ rappresenta lo stato (non normalizzabile) del sistema.

Osservazione *[]La non-normalizzabilità degli autostati dell'operatore di posizione non inficia l'analisi che segue: la completa localizzazione va intesa come procedura al limite, necessaria per poter pensare di separare al tempo* $t = t_0$ *(e quindi di fatto distinguere) le due particelle, comunque vicine esse siano.*

A differenza della descrizione classica però, non è più possibile assegnare anche le velocità delle particelle, poiché posizione e momento non commutano. Il principio di indeterminazione di Heisenberg impone che, se le posizioni iniziali $\mathbf{x}_1$ e $\mathbf{x}_2$ sono note con esattezza, allora le velocità iniziali sono completamente indeterminate. Quindi anche le posizioni ad un istante successivo sono ugualmente indeterminate. In effetti è facile verificare che la funzione d'onda di una particella esattamente localizzata ad un dato istante è distribuita su tutto lo spazio disponibile ad ogni istante successivo (si veda il cap. 5). Ciò che possiamo affermare in meccanica quantistica mediante successive misurazioni di posizione si riduce a questo:

> Al tempo $t = t_0$ una particella è stata localizzata in $\mathbf{x}_1$ e l'altra in $\mathbf{x}_2$; al successivo tempo $t = t_1$ una particella è stata localizzata in $\mathbf{x}_1'$ e l'altra in $\mathbf{x}_2'$.

Non vi è modo di stabilire *quale* delle due particelle localizzate al tempo $t = t_1$ è la particella localizzata in $\mathbf{x}_1$ al tempo $t = t_0$. Se anche insistiamo ad assegnare un indice distintivo alle particelle in base alla posizione assunta al tempo $t = t_0$, tale identificazione non si mantiene nel tempo, poiché le particelle non seguono traiettorie precise. Il concetto stesso di traiettoria esatta del moto di una o più particelle è privo di significato in meccanica quantistica[3], sicché le particelle identiche perdono completamente la loro individualità. In altri termini possiamo affermare che l'identità delle due particelle per quanto riguarda le loro proprietà fisiche individuali, si traduce in meccanica quantistica nella loro completa *indistinguibilità*. Questo costituisce il cosiddetto **principio di**

[3]Se il concetto di traiettoria reale, come soluzione di equazioni del moto, non è applicabile nella descrizione quantomeccanica del moto, il concetto di traiettoria virtuale è ancora valido: nella formulazione alla Feynman le ampiezze quantomeccaniche sono espresse come somma pesata su tutte le possibili traiettorie virtuali (vedi App. A.1), incluse quelle in cui due o più particelle identiche si scambiano fra loro i punti finali e/o iniziali.

indistinguibilità, il quale gioca un ruolo assolutamente centrale nella fisica contemporanea dei sistemi a molti corpi. È opportuno sottolineare che si tratta di un principio fisico fondamentale, la cui naturalità nel contesto della meccanica quantistica appare piuttosto chiara in base alle argomentazioni di cui sopra, ma che non discende in alcun modo rigoroso dai postulati introdotti e discussi al cap. 7[4].

Esaminiamo ora le implicazioni del principio di indistinguibilità sulla funzione d'onda $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \equiv \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \psi \rangle$ che descrive un arbitrario stato quantomeccanico $|\psi\rangle$ delle due particelle nella rappresentazione della posizione. Per quanto appena detto, tutte le proprietà fisiche derivabili da $|\psi\rangle$ devono coincidere con quelle derivabili da $P|\psi\rangle$, dove l'operatore di scambio P è definito da

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | P | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) \,. \tag{11.3}$$

Quindi, per ogni osservabile A dobbiamo richiedere

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | P A P | \psi \rangle \tag{11.4}$$

(si noti che $P = P^\dagger = P^{-1}$). Nel caso particolare $A = |\phi\rangle\langle\phi|$, con $|\phi\rangle$ uno stato arbitrario, avremo

$$|\langle \phi | \psi \rangle|^2 = |\langle \phi | P | \psi \rangle|^2 \,. \tag{11.5}$$

Se poniamo

$$|\psi_\pm\rangle = \tfrac{1}{2}(1 \pm P)|\psi\rangle \,,$$

l'Eq. (11.5) si riscrive

$$\mathfrak{Re}\, \langle \psi_+ | \phi \rangle \langle \phi | \psi_- \rangle = 0 \,.$$

Data l'arbitrarietà di $|\phi\rangle$, questa ammette solo due possibilità

$$|\psi_-\rangle = 0 \quad \text{oppure} \quad |\psi_+\rangle = 0 \,,$$

che equivalgono a

$$\psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) = \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \quad \text{oppure} \quad \psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) = -\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \,. \tag{11.6}$$

Nel primo caso la funzione d'onda si dice *simmetrica*, nel secondo *antisimmetrica*, sotto lo scambio $\mathbf{x}_1 \rightleftharpoons \mathbf{x}_2$ dei suoi due argomenti.

In effetti, possiamo rovesciare l'argomento appena descritto, formalizzando il problema nel linguaggio delle osservabili. *Definiamo* allora due particelle come identiche mediante la restrizione delle relative osservabili a quelle, e solo quelle, che corrispondono ad operatori autoaggiunti A che commutano con P: $[A, P] = 0$. Secondo questa nuova, più restrittiva definizione di osservabile, la condizione (11.4) è identicamente soddisfatta per

[4] Così come il dualismo onda-corpuscolo, anche il principio di indistinguibilità risulta inserito in un modo senz'altro più naturale ed elegante nel formalismo della *seconda quantizzazione*, ovvero nella *teoria dei campi quantizzati* (particolarmente nel caso relativistico).

ogni osservabile A, per cui $|\psi\rangle$ e $P|\psi\rangle$ devono corrispondere allo stesso stato fisico, cioè allo stesso raggio nello spazio di Hilbert: $P|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$. Ma $P^2 = 1$ implica allora

$$P|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle \ ,$$

che è un altro modo di scrivere l'Eq. (11.6).

Supponiamo ora che ad un dato istante la funzione d'onda di due particelle distinguibili sia fattorizzata, nel senso che

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \psi_1(\mathbf{x}_1)\psi_2(\mathbf{x}_2) \ .$$

Questa è la situazione tipica se, almeno nella fase di preparazione dello stato, le particelle non interagiscono. Me se le particelle sono identiche, dovremo simmetrizzare o antisimmetrizzare la funzione d'onda in

$$\psi_1(\mathbf{x}_1)\psi_2(\mathbf{x}_2) \pm \psi_1(\mathbf{x}_2)\psi_2(\mathbf{x}_1) \ ,$$

il che ha solitamente effetti osservabili. Ad esempio il valore medio di un potenziale di interazione differisce nei tre casi di cui sopra per un termine proporzionale al cosiddetto **integrale di scambio**

$$I_S = \int d^3x_1\, d^3x_2\, V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)\psi_1(\mathbf{x}_1)\psi_2(\mathbf{x}_2)\overline{\psi_1(\mathbf{x}_2)\psi_2(\mathbf{x}_1)} \ . \tag{11.7}$$

D'altra parte, se $\psi_1(\mathbf{x})$ e $\psi_2(\mathbf{x})$ hanno supporti disgiunti, allora $I_S = 0$ e il principio di indistinguibilità non ha effetti osservabili, almeno per quanto riguarda le osservabili *locali*. Questo discorso si applica proprio agli atomi uguali di un reticolo cristallino ben lontano dal punto di fusione. Fintanto che la sovrapposizione degli stati localizzati di ciacun atomo è trascurabile, il principio di indistinguibilità risulta irrilevante e potremmo quindi, come scelto all'inizio di questo paragrafo, considerare distinguibili gli atomi uguali del reticolo.

11.2. Bosoni e fermioni

Il principio di indistinguibilità per due particelle identiche può essere formulato in modo rigoroso come segue: sia Λ il dominio dello spazio $\mathbb{R}^3$ in cui sono confinate le particelle, per cui lo spazio di Hilbert degli stati, considerando le due particelle come distinguibili, è dato da Track 1

$$\mathcal{H}^{(2)} = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \ ,$$

dove $\mathcal{H}$ è isomorfo a $\mathcal{L}_2(\Lambda)$; allora il principio di indistinguibilità impone che lo spazio di Hilbert degli stati di due particelle identiche sia dato da

$$\mathcal{H}_+ = \tfrac{1}{2}(1 + P)\mathcal{H}^{(2)} \quad \text{oppure} \quad \mathcal{H}_- = \tfrac{1}{2}(1 - P)\mathcal{H}^{(2)} \ ,$$

dove l'operatore di scambio P è definito dalla (11.3). Si noti che la decomposizione $\mathcal{H}^{(2)} = \mathcal{H}_+ + \mathcal{H}_-$ è invariante sotto evoluzione temporale,

poiché l'identità delle particelle implica senz'altro che P commuta con la Hamiltoniana del sistema.

La generalizzazione del principio di indistinguibilità ad un numero N qualunque di particelle identiche è immediato. Anche l'aggiunta di ulteriori gradi di libertà interni di singola particella (quali lo spin elettronico, l'isospin mesonico o la polarizzazione di fononi e fotoni) non comporta alcuna difficoltà.

Sia dunque $\mathcal{H}$ lo spazio degli stati di una singola particella e $\{|\alpha\rangle\}$ una base in $\mathcal{H}$. Lo spazio di Hilbert degli stati di N particelle identiche e distinguibili è allora dato da

$$\mathcal{H}^{(N)} = \underbrace{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}}_{N \text{ volte}} \tag{11.8}$$

e possiede come base *canonica* i vettori

$$|\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N\rangle \equiv |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \ldots \otimes |\alpha_N\rangle \ .$$

Sullo spazio $\mathcal{H}^{(N)}$ sono naturalmente definiti gli operatori unitari di permutazione $U(P)$, tramite la loro azione sulla base canonica

$$U(P)\,|\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N\rangle = |\alpha_{P^{-1}1}, \alpha_{P^{-1}2}, \ldots, \alpha_{P^{-1}N}\rangle \ ,$$

dove

$$P : (1, 2, \ldots, N) \longrightarrow (P1, P2, \ldots, PN)$$

è una delle $N!$ permutazioni di N oggetti. Le permutazioni formano un gruppo finito, il cosiddetto *gruppo simmetrico* S_N e l'applicazione $P \to U(P)$ definisce una rappresentazione unitaria (altamente riducibile) di S_N su $\mathcal{H}_N$ (vedi App. B.1). Nel seguito, laddove non vi sia rischio di confusione, adotteremo lo stesso simbolo P anche per l'operatore $U(P)$. Nel caso in cui $\mathcal{H} = \mathcal{L}_2(\Lambda)$, $\Lambda \subset \mathbb{R}$, l'azione di P sulle funzioni d'onda $\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)$ si calcola immediatamente, adottando come base (generalizzata) $\{|\alpha\rangle\}$ gli autostati $\{|x\rangle\}$ della posizione,

$$\begin{aligned}(P\psi)(x_1, x_2, \ldots, x_N) &\equiv \langle x_1, x_2, \ldots, x_N|\, P\, |\psi\rangle \\ &= \overline{\langle\psi|\, P^{-1}\, |x_1, x_2, \ldots, x_N\rangle} \\ &= \psi(x_{P1}, x_{P2}, \ldots, x_{PN}) \ .\end{aligned}$$

Tra le permutazioni, rivestono un ruolo particolare le trasposizioni P_{jk}, $j, k = 1, 2, \ldots, N$, $j \neq k$, che sono definite da

$$P_{jk}\,\big|\ldots, \alpha_j, \ldots, \alpha_k, \ldots\big\rangle = \big|\ldots, \alpha_k, \ldots, \alpha_j, \ldots\big\rangle$$

per $j < k$ e $P_{kj} = P_{jk}$. Risulta evidente che $P_{jk}^2 = \mathbb{1}$, per cui le trasposizioni sono operatori autoaggiunti, con autovalori $+1$ e -1, che rappresentano la generalizzazione diretta a più particelle dell'operatore di scambio P

precedentemente introdotto nel caso di due particelle ($P = P_{12}$). Si noti che le trasposizioni non commutano:

$$\begin{cases} P_{jk}P_{jn} = P_{kn}P_{jk}, & \text{se } j \neq k \\ \left[P_{jk}, P_{\ell n}\right] = 0, & \text{se } j,k,\ell,n \text{ sono tutti distinti}. \end{cases} \tag{11.9}$$

Se applichiamo ora il principio di indistinguibilità a ciascuna delle $N(N-1)/2$ coppie di particelle, otteniamo che gli stati $|\psi\rangle$ ammissimili per particelle quantomeccaniche identiche sono autostati di P_{jk} per ogni coppia (jk). Ciò è compatibile con le regole di commutazione (11.9) solo se gli autovalori sono $+1$ o -1 simultaneamente per tutte le coppie (jk), cioè se

$$P_{jk}|\psi\rangle = +|\psi\rangle \quad \text{oppure} \quad P_{jk}|\psi\rangle = -|\psi\rangle\ , \quad \forall j,k\,. \tag{11.10}$$

Nel primo caso lo stato $|\psi\rangle$ si dice *totalmente simmetrico*, mentre nel secondo caso esso si dice *totalmente antisimmetrico*. Corrispondentemente, particelle i cui stati quantomeccanici sono totalmente simmetrici si chiamano **bosoni**, mentre particelle i cui stati quantomeccanici sono totalmente antisimmetrici si chiamano **fermioni**. Questa terminologia ha una origine storico-letteraria, che discende dalla statistica che descrive un gas perfetto di particelle identiche: i bosoni ubbidiscono alla statistica di Bose ed Einstein, propria di un sistema di particelle (non interagenti) con funzione d'onda simmetrica; i fermioni ubbidiscono alla statistica di Fermi e Dirac, propria di particelle (non interagenti) con funzione d'onda antisimmetrica.

Poiché ogni permutazione P si può esprimere (in molti modi) come prodotto di trasposizioni, l'Eq. (11.10) è equivalente alla

$$P|\psi\rangle = \zeta^{|P|}|\psi\rangle\ , \tag{11.11}$$

dove il nuovo numero quantico ζ vale $+1$ per i bosoni e -1 per i fermioni, mentre $|P| = |P^{-1}|$ rappresenta il numero di trasposizioni che compaiono in *una qualunque* decomposizione di P in trasposizioni. Il fatto che la parità di $|P|$, e quindi $\zeta^{|P|}$, non dipenda da quale decomposizione si adotta segue dalle regole di commutazione (11.9), che sono omogenee nelle P_{jk}, e dalla regola $P_{jk}^2 = \mathbf{1}$, che non cambia la parità.

In conclusione, possiamo riformulare il principio di indistinguibilità nel seguente modo, che possiamo considerare come un vero e proprio (quinto) postulato della meccanica quantistica:

Postulato V

Le osservabili di un sistema di N particelle identiche corrispondono ad operatori autoaggiunti che commutano con tutte le permutazioni $P \in S_N$ e, conseguentemente,

lo spazio di Hilbert degli stati è naturalmente ristretto a

$$\mathcal{H}_\zeta^{(N)} = P_\zeta \mathcal{H}^{(N)} ,$$

dove ζ vale $+1$ per bosoni e -1 per fermioni e $P_\pm$ è il simmetrizzatore o l'antisimmetrizzatore totale

$$P_\zeta = \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} \zeta^{|P|} P$$

P_+ e P_- sono operatori di proiezione. In particolare, applicando P_- ai vettori $|\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N\rangle$ della base canonica di $\mathcal{H}^{(N)}$, si ottiene una base per $\mathcal{H}_\zeta^{(N)}$:

$$\begin{aligned} |\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N\rangle_\zeta &\equiv \sqrt{N!}\, P_\zeta\, |\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} \zeta^{|P|}\, |\alpha_{P1}, \alpha_{P2}, \ldots, \alpha_{PN}\rangle \ . \end{aligned} \tag{11.12}$$

Risulta evidente che *due fermioni non possono trovarsi nel medesimo stato di particella singola*, dato che lo stato corrispondente in $\mathcal{H}^{(N)}$, avendo $\alpha_j = \alpha_k$ per almeno una coppia (jk), verrebbe annichilato da P_-. Questo costituisce il cosiddetto **principio di esclusione di Pauli**. Di fatto, esso è una diretta conseguenza della realizzazione fermionica del principio di indistinguibilità. È opportuno sottolineare che il principio di esclusione si applica agli stati di particella singola, ed in generale gli autostati dell'energia di N fermioni si possono scrivere esattamente in termini di stati di particella singola solo in assenza di interazione fra le particelle. Tuttavia, in moltissime situazioni reali dove i fermioni interagiscono, tale descrizione costituisce una buona approssimazione e rende eclatanti gli effetti del principio di esclusione: basti pensare alla tavola periodica degli elementi o alle proprietà elettriche e termodinamiche dei metalli (si veda ad esempio [**FR95**]).

Abbiamo di fatto già anticipato che in natura sono presenti entrambe le realizzazioni, bosonica e fermionica, del principio di indistinguibilità. Inoltre, si verifica sperimentalmente che esiste un ferreo legame tra la statistica e lo spin delle particelle: tutte le particelle con spin intero sono bosoni (mesoni π, fotoni, fononi, gravitoni ecc.), mentre tutte le particelle con spin semintero sono fermioni (elettroni, protoni, muoni, quarks etc.). Questa regola trova una rimarchevole previsione teorica nella teoria relativistica dei campi quantizzati, con il celebre *teorema spin-statistica* [**SW64**].

L'applicazione della suddetta regola alle "particelle composte", o "stati legati", quali i nucleoni, i nuclei, gli atomi, le molecole, è dettata dalla legge di composizione dello spin: se lo stato legato "contiene" un numero

pari (dispari) di fermioni (che hanno spin semintero), il suo spin è necessariamente intero (semintero) e la statistica è bosonica (fermionica). Così il protone, formato da tre quarks di spin 1/2, è un fermione (ed in particolare lo spin è 1/2) e lo stesso dicasi per il neutrone, mentre i mesoni π^0 e $\pi^\pm$, formati da due quarks, sono bosoni (con spin 0). Analogamente l'atomo di idrogeno (un protone ed un elettrone) è un bosone, mentre l'atomo di elio He^3 (due protoni, un neutrone, due elettroni) è un fermione. In generale, un nucleo di peso atomico pari (dispari) è bosonico (fermionico), mentre il corrispondente atomo neutro, che ha in più gli elettroni, è un bosone (fermione) se la somma del peso atomico e del numero atomico è pari (dispari).

11.2.1. Interazione di scambio. Consideriamo ora un esempio concreto, e cioè l'atomo di elio He^3 o He^4 nell'approssimazione più che ragionevole in cui si trascurano il moto nel nucleo e gli effetti relativistici. Il sistema è quindi costituito da due particelle fermioniche di spin 1/2, i due elettroni, con Hamiltoniana

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2\right) + V(|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2|) - 2V(|\mathbf{q}_1|) - 2V(|\mathbf{q}_2|)\ , \tag{11.13}$$

dove $V(r) = e^2 r^{-1}$ è il potenziale di Coulomb e $\mathbf{q}_j$ e $\mathbf{p}_j$ soddisfano alle regole di commutazione canoniche. Dato che lo spin vale 1/2, lo spazio $\mathcal{H}$ degli stati di ciascun elettrone è dato dai doppietti di funzioni d'onda a quadrato sommabile, che possiamo scrivere, in una notazione mista tra *bra-ket* e funzioni d'onda,

$$\langle \mathbf{x}|\psi\rangle \equiv |\psi(\mathbf{x})\rangle = \sum_{\sigma=\pm} \psi_\sigma(\mathbf{x})\,|\sigma\rangle\ ,$$

dove $|\sigma\rangle$ rappresenta l'autovettore della terza componente dello spin, s_z, con autovalore $\hbar\sigma/2$. Lo spazio complessivo $H^{(2)} = \mathcal{H}\otimes\mathcal{H}$, considerando i due elettroni distinguibili, è quindi formato dai quadrupletti di funzioni d'onda sulle coppie di punti dello spazio

$$|\psi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\rangle = \sum_{\sigma_1,\sigma_2=\pm} \psi_{\sigma_1\sigma_2}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\,|\sigma_1\sigma_2\rangle\ .$$

Sugli stati di spin $|\sigma_1\sigma_2\rangle$ agiscono in modo ovvio i due operatori di spin $\mathbf{s}_1 = \hbar\boldsymbol{\sigma}/2\otimes\mathbb{1}$ e $\mathbf{s}_2 = \mathbb{1}\otimes\hbar\boldsymbol{\sigma}/2$, le cui componenti sono conservate nel tempo poiché H non dipende esplicitamente dagli spin elettronici.

Imponiamo ora, in accordo con il principio di indistinguibilità, che lo stato dei due elettroni sia antisimmetrico sotto simultaneo scambio delle

coordinate e degli spin:

$$
\begin{aligned}
P\,|\psi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\rangle &\equiv \sum_{\sigma_1,\sigma_2=\pm} (P\psi_{\sigma_1\sigma_2})(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)P\,|\sigma_1\sigma_2\rangle \\
&= \sum_{\sigma_1,\sigma_2=\pm} \psi_{\sigma_1\sigma_2}(\mathbf{x}_2,\mathbf{x}_1)\,|\sigma_2\sigma_1\rangle \\
&= \sum_{\sigma_1,\sigma_2=\pm} \psi_{\sigma_2\sigma_1}(\mathbf{x}_2,\mathbf{x}_1)\,|\sigma_1\sigma_2\rangle = -\,|\psi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\rangle \ ,
\end{aligned}
\tag{11.14}
$$

ovvero $\psi_{\sigma_1\sigma_2}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) = -\psi_{\sigma_2\sigma_1}(\mathbf{x}_2,\mathbf{x}_1)$. Conviene evidentemente cambiare la base nello spazio degli spin, passando da quella in cui s_1^z e s_2^z sono diagonali, a quella in cui sono diagonali $\mathbf{S}^2$ e S^z, dove $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$ è lo spin totale:

$$
|\psi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\rangle = \psi_{00}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\,|0,0\rangle + \sum_{m=-1,0,+1} \psi_{1m}(\mathbf{x}_2,\mathbf{x}_1)\,|1,m\rangle
\tag{11.15}
$$

con, per ipotesi

$$
\mathbf{S}^2\,|j,m\rangle = \hbar^2 j(j+1)\,|j,m\rangle \ , \quad S^z\,|j,m\rangle = \hbar m\,|j,m\rangle \ .
$$

Dato che lo stato di singoletto (vedi cap. 8)

$$
|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle - |-+\rangle\right)
$$

è manifestamente antisimmetrico, mentre i tre stati del tripletto

$$
|1,-1\rangle = |--\rangle \ , \quad |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle + |-+\rangle\right) \ , \quad |1,-1\rangle = |--\rangle
$$

sono manifestamente simmetrici, la richiesta (11.14) è equivalente a

$$
\begin{aligned}
\psi_{00}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) &= +\,\psi_{00}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) \\
\psi_{1m}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) &= -\,\psi_{1m}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) \ .
\end{aligned}
\tag{11.16}
$$

Si noti che le osservabili conservate $\mathbf{S}^2$ e S^z assumono valori ben definiti se e solo una sola delle quattro funzioni d'onda orbitali ψ_{00} e ψ_{1m}, $m = -1,0,1$, è diversa da zero. In tal caso lo stato $|\psi\rangle$ risulta fattorizzato in una parte orbitale ed una di spin (la ricerca degli autovettori di H sotto forma fattorizzata orbitale-spin è possibile in generale per un numero arbitrario di particelle, purché H non dipenda dallo spin). Consideriamo dunque il sottospazio con $j = 0$ formato dai singoletti di spin. Le autofunzioni orbitali dell'energia sono allora simmetriche. Viceversa, se $j = 1$ (tripletto), le autofunzioni sono antisimmetriche. Ora, in generale, vi sono autofunzioni non degeneri dell'energia con simmetria definita, per cui lo spettro energetico nel sottospazio del singoletto differisce da quello del tripletto anche se l'Hamiltoniana non dipende esplicitamente dagli spin elettronici. Questo effetto prende comunemente il nome di **interazione di scambio**.

Possiamo approfondire l'analisi con un approccio perturbativo, in cui trascuriamo inizialmente la repulsione coulombiana fra i due elettroni. In questo caso l'Hamiltoniana (11.13) si riduce a

$$H_0 = h(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1) + h(\mathbf{q}_2, \mathbf{p}_2) \ , \quad h(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 - 2V(|\mathbf{q}|) \ ,$$

cioè alla somma di due Hamiltoniane idrogenoidi disaccoppiate, per cui possiamo porre, per il singoletto

$$\psi_{00}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \phi_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1)\phi_{\alpha_2}(\mathbf{x}_2) + \phi_{\alpha_1}(\mathbf{x}_2)\phi_{\alpha_2}(\mathbf{x}_1) \ , \tag{11.17}$$

dove $\phi_\alpha(\mathbf{x})$ sono autofunzioni di h

$$h|\phi_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |\phi_\alpha\rangle$$

e α è un indice collettivo per i tre corrispondenti numeri quantici (principale, orbitale, azimutale). Lo spettro energetico corrispondente a (11.17) è chiaramente dato da $E = \varepsilon_{\alpha_1} + \varepsilon_{\alpha_2}$, senza alcuna restrizione su α_1 e α_2. Analogamente, ciascuna delle tre funzioni d'onda ψ_{1m}, $m = -1, 0, 1$ associate al tripletto assume la forma

$$\psi_{1m}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \phi_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1)\phi_{\alpha_2}(\mathbf{x}_2) - \phi_{\alpha_1}(\mathbf{x}_2)\phi_{\alpha_2}(\mathbf{x}_1) \tag{11.18}$$

con spettro energetico ancora additivo, $E = \varepsilon_{\alpha_1} + \varepsilon_{\alpha_2}$, ma dove necessariamente $\alpha_1 \neq \alpha_2$. In particolare, se ε_0 è l'autovalore dello stato fondamentale $|\phi_0\rangle$ di h, allora lo stato fondamentale di H_0 è un singoletto di spin non degenere, con energia $E_0 = 2\varepsilon_0$. Se ε_1 è il primo livello eccitato di h (che è non degenere), allora il primo livello eccitato di H_0 è $E_1 = \varepsilon_0 + \varepsilon_1$, ed è quattro volte degenere, corrispondendo a stati sia di singoletto che di tripletto. Vediamo dunque che l'interazione di scambio è presente anche in assenza di interazione diretta, nel qual caso essa si riduce alle conseguenze energetiche del principio di esclusione di Pauli.

Consideriamo ora l'Hamiltoniana completa $H = H_0 + V(|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2|)$. Intuitivamente possiamo attenderci che sulle funzioni d'onda simmetriche, come quella del singoletto $\psi_{00}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$, il potenziale di repulsione coulombiana assuma valori di aspettazione maggiori che sulle funzioni antisimmetriche proprie del tripletto, poiché necessariamente $\psi_{1m}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 0$. Possiamo facilmente controllare questa ipotesi al primo ordine della teoria delle perturbazioni, calcolando il valor medio di $V(|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2|)$ negli stati imperturbati della forma (11.17) o (11.18). Si trova allora che il livello fondamentale resta non degenere, subendo la manifestamente positiva correzione

$$E_0 \to E_0 + \int d^3x_1\, d^3x_2\, V(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|)|\phi_0(\mathbf{x}_1)|^2|\phi_0(\mathbf{x}_2)|^2 \tag{11.19}$$

mentre la degenerazione del primo livello eccitato E_1 viene parzialmente rimossa

$$E_1 \to E_1 + I_D \pm I_S$$

$$\begin{aligned} I_D &= \int d^3x_1\, d^3x_2\, V(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|)|\phi_0(\mathbf{x}_1)|^2|\phi_1(\mathbf{x}_2)|^2 \\ I_S &= \int d^3x_1\, d^3x_2\, V(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|)\phi_0(\mathbf{x}_1)\overline{\phi_0(\mathbf{x}_2)}\phi_1(\mathbf{x}_2)\overline{\phi_1(\mathbf{x}_1)}\,, \end{aligned} \tag{11.20}$$

dove il segno + oppure − si applica, rispettivamente, al singoletto od al tripletto (il quale resta degenere in virtù della simmetria sotto rotazioni nello spazio dello spin totale). Riconosciamo in I_S un esempio di integrale di scambio già incontrato nel primo paragrafo di questo capitolo, Eq. (11.7).

Alcuni commenti ci sembrano opportuni. Innanzitutto è chiaro che le considerazioni appena fatte si applicano in generale, per qualunque scelta del potenziale $V(\mathbf{q})$ di singola particella e del potenziale $V(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)$ di interazione fra le particelle. La decomposizione (11.15) non dipende in alcun modo da tale scelta, per cui il risultato (11.16) è valido in generale, per qualunque dinamica dei due elettroni (inclusi accoppiamenti espliciti degli spin). Effetti di interazione di scambio sono perciò sempre presenti. D'altro canto però, la rilevanza di espressioni analitiche più dettagliate come quelle in Eq. (11.17), (11.18), (11.19) e (11.20) dipende in modo cruciale dalla forma esatta di $V(\mathbf{q})$ e di $V(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)$. In effetti, proprio nel caso dell'atomo di elio la teoria delle perturbazioni come sopra impostata è solo qualitativamente corretta. Quantitativamente essa è poco valida, poiché la repulsione coulombiana fra i due elettroni è dello stesso ordine di grandezza dell'attrazione coulombiana con il nucleo. La situazione di fatto migliora con il crescere del numero atomico, grazie alla possibilità di tener conto della repulsione coulombiana mediante la deformazione del potenziale attrattivo con il nucleo (vedi ad esempio [**FR95**]).

CAPITOLO 12

Teoria dell'urto

Dall'esperimento di Rutherford sulla diffusione (*scattering*) di particelle α lo studio di processi di urto tra particelle ha assunto un ruolo dominante nella ricerca di fisica atomica e subatomica. In questo capitolo considereremo gli elementi della trattazione quantistica dei processi d'urto. Limiteremo la trattazione al caso di **urti elastici** tra due particelle senza spin.

12.1. L'equazione integrale della diffusione

Track 1

Un processo d'urto si può descrivere nel modo seguente. Un pacchetto di particelle (elementari o composte) viene preparato ad una certa energia e con momento ben definito (nei limiti posti dagli apparati e dal principio di indeterminazione); viene fatto quindi collidere con un altro pacchetto simile (come avviene nei moderni *colliders*) oppure viene scaricato contro un bersaglio fisso. In ogni caso, per descrivere la dinamica dell'urto, ci si può mettere nel sistema di riferimento del baricentro e ridurre il problema a quello del moto di una particella in un campo di forze esterno, nello stesso modo come abbiamo descritto gli stati stazionari dell'atomo di idrogeno eliminando il moto del baricentro. Questa impostazione funziona per i processi elastici descritti da forze conservative a due corpi; la trattazione della teoria dell'urto con queste limitazioni è nota come *teoria dello scattering da potenziale*. La trattazione generale dei processi anelastici esula dai confini di questo libro; si vedano [**LL76, New66**].

Consideriamo perciò un pacchetto d'onde $\psi(\mathbf{x}, t)$ avente distribuzione nello spazio dei momenti fortemente concentrata intorno al momento $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. Sul pacchetto agisce una forza a corto raggio d'azione descritta dal potenziale $V(\mathbf{x})$ che assumiamo a supporto compatto ($V(\mathbf{x}) = 0$ per $r = |\mathbf{x}| > a$). Secondo la tecnica generale, conviene analizzare il moto del pacchetto in termini di soluzioni stazionarie. Seguiremo il metodo già adottato per l'effetto tunnel. Scriviamo quindi l'equazione di Schroedinger stazionaria nella forma

$$(\triangle + k^2)\,\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \mathcal{U}(\mathbf{x})\,\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$$

dove abbiamo posto $k = |\mathbf{k}| = \sqrt{2mE}/\hbar$, e $\mathcal{U} = 2mV/\hbar^2$. Trasformiamo ora l'equazione di Schroedinger nella forma di un'equazione integrale (vedi l'Eq. (12.4))

$$(12.1)\qquad \begin{aligned}(\triangle + k^2)\,\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) &= \phi(\mathbf{x})\\ \phi(\mathbf{x}) &= \mathcal{U}(\mathbf{x})\,\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})\end{aligned}$$

Nella prima equazione invertiamo l'operatore $\triangle + k^2$ introducendo la **funzione di Green** $G_k(\mathbf{x})$ ([**BRS93**], cap. 3) che soddisfa l'equazione

$$(12.2)\qquad (\triangle + k^2)\,G_k(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x})\ .$$

L'equazione si risolve in modo elementare introducendo coordinate polari: assumendo che G dipenda solo da r troviamo

$$\left(\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + k^2\right) G_k(r) = 0, \quad \text{per } r > 0$$

e dunque otteniamo due soluzioni linearmente indipendenti

$$(12.3)\qquad G_k^{\pm} = -\frac{e^{\pm ikr}}{4\pi r}\ .$$

(La costante di normalizzazione è fissata in base alla relazione $\triangle r^{-1} = -4\pi\delta(\mathbf{r})$, nota dalla elettrostatica). Alternativamente si può procedere utilizzando l'integrale di Fourier per valutare l'operatore risolvente. Ricordiamo che dal momento che stiamo studiando lo spettro continuo dell'Hamiltoniano, l'operatore risolvente presenta un taglio per cui è necessario considerare le due determinazioni $(\triangle + k^2 \pm i\varepsilon)$, che corrispondono alle due soluzioni $G^{\pm}$. Passando alla trasformata di Fourier troviamo così

$$\tilde{G}_k^{\pm}(\mathbf{k}') = (k^2 - k'^2 \pm i\varepsilon)^{-1},$$

da cui

$$G_k^{\pm}(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3}\int d^3k'\,\frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}}}{k^2 - k'^2 \pm i\varepsilon}\ .$$

Introducendo un sistema polare nello spazio $\mathbf{k}'$ in modo che l'asse k'_3 sia nella direzione $\mathbf{x}$, si può integrare facilmente sugli angoli per ottenere

$$\begin{aligned}G_k^{\pm}(\mathbf{x}) &= (2\pi)^{-2}\int_0^{\infty} k'^2 dk'\,\frac{e^{ik'r} - e^{-ik'r}}{2ik'r\,(k^2 - k'^2 \pm i\varepsilon)}\\ &= \frac{1}{ir(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{\infty} k'\,dk'\,\frac{e^{ik'r}}{k^2 - k'^2 \pm i\varepsilon}\end{aligned}$$

L'integrale si può ora valutare con il metodo dei residui adottando un cammino di integrazione costituito da un segmento $-R \to +R$ sull'asse reale, chiuso con una semicirconferenza di raggio R nel semipiano superiore. Si trova perciò il risultato dell'Eq. (12.3), tenendo conto che per il segno +

contribuisce il polo in $k' = k + i\varepsilon$, mentre per il segno negativo contribuisce il polo in $k' = -k - i\varepsilon$. Inserendo la funzione di Green $G_k^{\pm}$ nell'equazione (12.1) si ottiene

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} - \frac{1}{4\pi}\int d^3x' \, \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}\,\mathcal{U}(\mathbf{x}')\,\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{x}') \tag{12.4}$$

dove abbiamo tenuto conto che si può aggiungere alla $\psi_{\mathbf{k}}$ una soluzione arbitraria dell'equazione di particella libera con energia fissata.

È importante realizzare che la struttura astratta dell'equazione integrale che abbiamo così ottenuto è di validità assai generale. Si applica cioè ad ogni situazione in cui ad una Hamiltoniana "libera" H_0 si aggiunge un'interazione V e gli stati stazionari di diffusione soddisfano un'equazione del tipo

$$|E\pm\rangle = |E\rangle + G_E^{\pm}\, V\, |E\pm\rangle \ . \tag{12.5}$$

L'operatore $G_E^{+} = (E - H_0 + i\varepsilon)^{-1}$ è detto *il propagatore* e l'equazione è nota come **equazione di Lippman-Schwinger**. Abbiamo già avuto un esempio di questo formalismo nella trattazione dell'effetto tunnel (vedi §6.3). L'equazione di Schroedinger nella forma integrale presenta il doppio vantaggio di *i*) incorporare le condizioni al contorno sulla soluzione e *ii*) di ammettere una soluzione per serie (Born). Vediamo con ordine questi due punti.

12.1.1. Sezione d'urto differenziale. La differenza tra le due scelte di segno nella funzione di Green $G^{\pm}$ viene alla luce considerando il comportamento asintotico delle soluzioni per $r \to \infty$. Tenendo conto del raggio d'azione finito del potenziale, si potrà approssimare $|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|$ nella (12.4)

$$|\mathbf{x}-\mathbf{x}'| \approx r - \hat{\mathbf{x}}\cdot\mathbf{x}',$$

(dove $\hat{\mathbf{x}}$ è il vettore unitario in direzione $\mathbf{x}$) da cui

$$\begin{aligned}\int d^3x' \, \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}\,\mathcal{U}(\mathbf{x}')\,\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x}') &\approx \int d^3x' \, \frac{e^{ikr - ik\hat{\mathbf{x}}\cdot\mathbf{x}'}}{r}\,\mathcal{U}(\mathbf{x}')\,\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x}') \\ &= \frac{e^{ikr}}{r}\int d^3x' \, e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'}\,\mathcal{U}(\mathbf{x}')\,\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x}')\end{aligned}$$

avendo introdotto il nuovo vettore $\mathbf{k}'$ che ha la direzione di $\mathbf{x}$ e lunghezza pari a k.

Introduciamo ora la funzione

$$f_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = -\frac{1}{4\pi}\int d^3x e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}}\,\mathcal{U}(\mathbf{x})\,\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x}), \tag{12.6}$$

che viene chiamata, per motivi che saranno presto evidenti, l'**ampiezza di diffusione**. Inserendo nell'equazione abbiamo allora la rappresentazione asintotica delle soluzioni $\psi^{(+)}$:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x}) \approx e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + f_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\,\frac{e^{ikr}}{r}\,. \tag{12.7}$$

Troviamo perciò che la soluzione $\psi^{(+)}$ nella regione a grandi distanze dal centro diffusore è costituita da un'onda piana a cui si sovrappone un'onda sferica, modulata dal fattore f. Per una descrizione dipendente dal tempo di un evento di diffusione dovremo costruire un pacchetto d'onde

$$\psi(x,t) = \int d^3k\, c(\mathbf{k})\, \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x})\, e^{-i\hbar k^2 t/2m}$$

con $c(\mathbf{k})$ concentrata intorno a un dato $\mathbf{k}_0$. Non è difficile applicare lo stesso metodo adottato per lo studio dell'effetto tunnel: per grandi valori di t applichiamo il metodo della fase stazionaria e troviamo che il termine di onda piana rappresenta il moto del pacchetto libero; il termine di onda sferica non dà contributo per t negativo mentre è importante per t positivo e rappresenta un'onda sferica che si diffonde dal centro verso l'esterno con un'ampiezza dipendente da $|f_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2$. Naturalmente la stessa analisi si può applicare alle soluzioni $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$. Queste portano a stati che per $t \to -\infty$ sono costituiti da un'onda piana sovrapposta ad un'onda di implosione verso il centro mentre per $t \to +\infty$ sono rappresentati da un'onda piana che si propaga in direzione $-\mathbf{k}$. Queste soluzioni rappresentano l'inversione temporale delle soluzioni $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$. Sebbene ammissibile dal punto di vista matematico, un simile stato è assai arduo da preparare, in quanto è necessario assicurare la coerenza della funzione d'onda iniziale su una regione macroscopica. Per questo motivo si utilizza ordinariamente la base di stati $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$. Per maggiore precisione dobbiamo avvertire che l'insieme delle soluzioni $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ costituisce una base completa per gli stati a energia positiva; per avere una base nello spazio di Hilbert bisogna includere gli eventuali stati legati.

Un esperimento di diffusione ha come risultato la determinazione del flusso di particelle in ogni direzione (almeno quella porzione di angolo solido coperto da rivelatori). Il numero di particelle rivelate nell'angolo solido $d\Omega(\vartheta,\varphi)$ per unità di tempo è proporzionale al flusso incidente Φ tramite un coefficiente di proporzionalità $d\sigma(\vartheta,\varphi)$:

$$dN(\vartheta,\varphi) = \Phi\, d\sigma(\vartheta,\varphi)\,.$$

Il rapporto $d\sigma/d\Omega$ è denominato **sezione d'urto differenziale**. Nella descrizione quantistica $d\sigma/d\Omega$ ad una data energia si ottiene dalla soluzione $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$: il flusso di particelle è valutabile in senso probabilistico quale

flusso della corrente di probabilità $\mathbf{j} = m^{-1}\mathfrak{Re}\{\bar{\psi}\mathbf{p}\psi\}$. Consideriamo il rivelatore in posizione (ϑ, φ) a distanza L dal centro diffusore. La superficie sensibile sarà $dA = L^2 \Delta\vartheta\, \Delta\varphi$, con la normale orientata secondo $\mathbf{x}$. Il flusso di probabilità in ingresso nel rivelatore sarà dunque

$$dN = dA\, \frac{\hbar}{m}\, \mathfrak{Im} \left\{ \overline{\psi_k^{(+)}}\, \frac{\partial}{\partial r} \psi_k^{(+)} \right\} .$$

Inserendo l'espressione asintotica per $\psi_k^{(+)}$ e prendendo il limite per L grande si ottiene

$$dN = \Delta\Omega\, \frac{\hbar k}{m} \left[L^2 \cos\vartheta + L\, \mathfrak{Re}\left\{ f(\vartheta, \varphi)\, e^{ikL(\cos\vartheta - 1)} \right\} + |f(\vartheta, \varphi)|^2 \right].$$

Si noti che il primo termine divergente come L^2 è in realtà presente anche in assenza di centro di diffusione e rappresenta perciò il contributo dell'onda incidente: nella descrizione dipendente dal tempo questo termine è confinato alla dimensione trasversale del fascio incidente e non contribuisce se non per $\vartheta = 0$. Il secondo termine rappresenta l'interferenza tra onda incidente e onda diffusa; il suo contributo è trascurabile per via della fase rapidamente oscillante $\exp(ikL\cos\vartheta)$ che ancora contribuisce solo intorno alla direzione del fascio. L'ultimo termine rappresenta il genuino contributo di diffusione. Si trova poi che il flusso incidente è precisamente $\hbar k/m$. Si ha pertanto

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta, \varphi)|^2 , \tag{12.8}$$

il che giustifica il termine di *ampiezza di diffusione* per la funzione f.

12.1.2. Serie di Born. Il calcolo dell'ampiezza di diffusione può essere affrontato con il metodo iterativo già adottato nel caso dell'effetto tunnel (si ricordi l'Eq. (6.19)). Dall'equazione di Lippman-Schwinger si ottiene formalmente

$$|E+\rangle = (1 - G_E^+ V)^{-1}\, |E\rangle \ .$$

Dalla soluzione per $|E+\rangle$ si ottiene immediatamente l'ampiezza di diffusione applicando la formula (12.6). L'approssimazione di ordine più basso è ottenuta ponendo $|E+\rangle \approx |E\rangle$, da cui segue

$$f_{kk'}^{\text{BORN}} \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x\, e^{i(k-k')\cdot x}\, V(x)$$

ossia f^{born} è proporzionale alla trasformata di Fourier del potenziale *valutata nel momento trasferito* $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$.

PROBLEMA 12.1-1 []Determinare l'approssimazione di Born nel caso del potenziale di Yukawa $V = Kr^{-1} \exp\{-\eta r\}$.

SOLUZIONE *[]Il calcolo della trasformata di Fourier porta con calcoli elementari a*

$$f^{\text{BORN}} = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{K}{\eta^2 + |\mathbf{k}-\mathbf{k}'|^2}\,.$$

Si noti che nel limite $\eta \to 0$ *il potenziale tende a quello di Coulomb; se poniamo nel contempo* $K = Z_1 Z_2\, e^2$*, otteniamo la sezione d'urto*

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx \frac{(2mZ_1Z_2e^2)^2}{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|^4} = \frac{(Z_1Z_2e^2)^2}{16E^2}\left(\sin\tfrac{1}{2}\theta\right)^{-4}\,, \tag{12.9}$$

che è la stessa formula di Rutherford che si ottiene attraverso un calcolo di meccanica classica.

PROBLEMA 12.1-2 []Scrivere l'equazione di Lippman-Schwinger in termini della funzione d'onda nello spazio dei momenti.

PROBLEMA 12.1-3 []Determinare l'ampiezza di diffusione per il potenziale di Yukawa al secondo ordine nell'approssimazione di Born (utilizzare la formula di Feynman dell'App. B.7.2).

La serie di Born per l'ampiezza di diffusione è ottenuta dall'equazione di Lippman-Schwinger attraverso lo sviluppo

$$(1 - G_E^+ V)^{-1} = \sum_{n\geq 0}(G_E^+ V)^n,$$

che risulta convergente se la norma dell'operatore $G_E^+ V$ è inferiore a uno. Il verificarsi di questa condizione dipende sia da V che da E. Una condizione di semplice applicabilità è la seguente (vedi [**RS79**], Teor. XI.43): sia V sommabile ($\|V\|_1 \equiv \int d^3x\,|V(\mathbf{x})| < \infty$) e nella classe di Rollnick, cioè

$$\|V\|_R^2 \equiv \int\int d^3x\, d^3y\, \frac{V(\mathbf{x})V(\mathbf{y})}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} < \infty$$

allora esiste un'energia E_0 tale che la serie di Born è convergente per ogni $E > E_0$. Inoltre se la norma di Rollnick soddisfa $\|V\|_R < 4\pi$ allora si ha convergenza per ogni E positiva (vedi anche [**New66**], § 10.3). Si noti che la norma di Rollnick entra in modo molto naturale nel problema. Infatti ammettendo che $V(\mathbf{x})$ e $1/V(\mathbf{x})$ siano entrambe funzioni limitate ($0 < a < V(\mathbf{x}) < b$), l'operatore $G_E^+ V$ è legato da una relazione di similitudine a $\mathcal{K} = \sqrt{V}G_E^+\sqrt{V}$ e per $\mathcal{K}$ si ha

$$\|\mathcal{K}\|^2 \equiv \operatorname{Tr}\mathcal{K}^2 = (4\pi)^{-2}\|V\|_R^2\,,$$

e dunque il massimo autovalore di $G_E V$ è inferiore a uno se $\|V\|_R < 4\pi$. Si noti infine che in base ad un teorema di Birman-Schwinger la stessa grandezza $\|V\|_R^2/(4\pi)^2$ rappresenta *un limite superiore al numero di stati legati* per l'operatore $-\triangle - V$ (si veda [**LSW76**], p. 312), il che suggerisce

l'esistenza di una relazione tra la convergenza della serie di Born e l'assenza di stati legati per il potenziale $-|V(\mathbf{x})|$ (si veda l'ampia trattazione in [**New66**]).

PROBLEMA 12.1-4 []Discutere la convergenza della serie di Born per l'ampiezza di trasmissione nel problema in una dimensione.

12.2. Diffusione da un campo centrale

Consideriamo ora quali semplificazioni si possano introdurre nell'analisi dei processi di diffusione nel caso in cui il potenziale sia a simmetria centrale. Sappiamo che in questo caso il momento angolare è una costante del moto e perciò risulta possibile introdurre una base di autostati comuni di H, L^2, L_z, con la scelta ovvia di disporre l'asse zeta nella direzione del fascio incidente. Dette $R_{kl}(r)\, Y_l^m(\Omega)$ le autofunzioni dello spettro continuo, si potranno sviluppare gli stati di diffusione nella forma Track 1

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{x}) = \sum_{lm} c_l\, R_{kl}(r)\, P_l(\cos\vartheta),$$

dove si è tenuto conto che il fascio incidente ha in genere simmetria cilindrica intorno alla direzione di propagazione e quindi lo stato è autostato di L_z con $m = 0$ ($Y_l^0 \propto P_l(\cos\vartheta)$). Questa rappresentazione della funzione d'onda è nota come **sviluppo in onde parziali**; da essa discende, come mostreremo, una semplice espressione dell'ampiezza di diffusione. Limitandoci per semplicità al caso di potenziali a supporto compatto ($V(r) = 0$ per $r > a$), le funzioni $R_{kl}(r)$ sono date dalle note soluzioni di particella libera per grande r; ricordiamo che la soluzione generale è data da

$$R_{kl}(r) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr)\,,\ r > a,$$

dove le funzioni di Bessel sferiche j_l, n_l hanno il noto sviluppo asintotico

$$j_l(kr) \sim \sin\left(kr - \tfrac{1}{2}l\pi\right)/kr$$
$$n_l(kr) \sim -\cos\left(kr - \tfrac{1}{2}l\pi\right)/kr\,.$$

In assenza di potenziale diffusore la soluzione è data dalla sola soluzione regolare $j_l(kr)$; nella regione asintotica tuttavia l'unica differenza tra j_l e la combinazione lineare di j_l e n_l consiste in un semplice *sfasamento*. Ponendo infatti $B_l/A_l = \tan\delta_l(k)$ l'andamento asintotico equivale a

$$R_{kl}(kr) \sim a_l(k)\, \sin\left(kr - \tfrac{1}{2}l\pi + \delta_l\right)/kr\,,$$

per una scelta opportuna delle costanti a_l. Mostriamo ora che l'insieme degli **sfasamenti** $\delta_l(k)\,, l = 0, 1, 2, \ldots$ *determina interamente l'ampiezza di diffusione*. Si identifichi lo sviluppo in onde parziali con l'andamento

asintotico generale della funzione $\psi_k^{(+)}$; indicando con $f_k(\vartheta)$ l'ampiezza di diffusione si avrà

$$e^{ikz} + f_k(\vartheta)\frac{e^{ikr}}{r} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l(k)\, P_l(\cos\vartheta)\, \sin\left(kr - \tfrac{1}{2}l\pi + \delta_l\right)/kr\,.$$

Si inserisce a questo punto lo sviluppo in onde parziali dell'onda piana (Eq. B.5 a p. 514) e si ottiene la relazione

$$f_k(\vartheta)\frac{e^{ikr}}{r} + \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l\,\frac{\sin(kr - \frac{1}{2}\pi l)}{kr}\,P_l(\cos\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l(k)\,\frac{\sin(kr - \frac{1}{2}\pi l + \delta_l)}{kr}\,P_l(\cos\vartheta)\,.$$

Isolando i termini proporzionali a $e^{\pm ikr}$ si ottengono due relazioni indipendenti che con semplici passaggi algebrici forniscono il risultato

$$\begin{aligned} a_l(k) &= (2l+1)i^l\, e^{i\delta_l(k)} \\ f_k(\vartheta) &= \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{e^{2i\delta_l(k)} - 1}{2ik}\,P_l(\cos\vartheta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{k}\,e^{i\delta_l(k)}\sin\delta_(k)\,P_l(\cos\vartheta). \end{aligned}$$

Si vede dunque che la conoscenza degli sfasamenti permette di determinare completamente l'ampiezza di diffusione. In particolare, integrando sull'angolo solido e ricordando la relazione di ortogonalità dei polinomi di Legendre (Eq. B.6 a p. 514) si ottiene la *sezione d'urto totale*

$$\begin{aligned} \sigma &= \int d\Omega\, |f|^2 \\ &= \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,\sin^2\delta_l(k) \end{aligned}$$

PROBLEMA 12.2-5 []Dimostrare la validità della seguente relazione

$$\mathfrak{Im}\,\{f_k(\vartheta = 0)\} = \frac{k}{4\pi}\,\sigma, \tag{12.10}$$

un risultato valido in generale e noto come **teorema ottico** (vedi [**Sak90, New66**]).

PROBLEMA 12.2-6 []Determinare le ampiezze parziali di diffusione per una sfera perfettamente riflettente di raggio a.

SOLUZIONE *[]Si tratta solo di imporre la condizione di annullamento in* $r = a$ *alla soluzione generale radiale per la particella libera: si ottiene*

$$A_l j_l(ka) + B_l n_l(ka) = 0\,,$$

da cui segue $\tan\delta_l(k) = j_l(ka)/n_l(ka)$. *Si noti che per* ka *molto piccolo si approssima facilmente il risultato utilizzando le formula dell'App. B.6.2 e si trova che il termine dominante è quello in onda* s

$$\delta_0 \approx ka\,,$$

che contribuisce alla sezione d'urto totale $4\pi a^2$*, cioè* quattro volte la sezione geometrica della sfera *(per* k *piccolo non c'è da aspettarsi che le particelle si comportino come pallini da caccia).*

12.3. Seconda quantizzazione

Track 2

Il formalismo convenzionale della meccanica quantistica, così come finora presentato, non risulta molto efficiente nella descrizione dei sistemi di particelle identiche, particolarmente nel caso di un numero N *macroscopicamente grande di particelle. Basti osservare che la simmetrizzazione o l'antisimmetrizzazione totale di una funzione d'onda contiene un numero* $\mathsf{N}!$ *di termini. In questa sezione descriveremo un formalismo più pratico ed efficiente, che prende il nome di* seconda quantizzazione. *Questa definizione si basa sulla seguente analogia: la prima quantizzazione, o quantizzazione* tout court, *corrisponde a promuovere le osservabili classiche, in primo luogo le coordinate canoniche cartesiane, le* $\{\mathsf{p}\}$ *e le* $\{\mathsf{q}\}$, *da funzioni a valori reali sullo spazio delle fasi ad operatori, in genere non commutanti, su uno spazio di Hilbert. Tipicamente, questo spazio è formato da funzioni d'onda, che a loro volta sono semplici funzioni (a valori complessi) sullo spazio delle configurazioni del sistema fisico, e soddisfano all'equazione di Schroedinger, che è, nei casi più emblematici, una equazione differenziale alle derivate parziali di stampo classico. Risulta naturale (anche se in un certo senso improprio) assimilare questa equazione ad altre equazioni fondamentali, lineari e non, della fisica dei mezzi continui e dell'elettromagnetismo. In questa ottica, la seconda quantizzazione ripete l'operazione della prima, questa volta sulle "funzioni d'onda" governate da tali equazioni, promuovendole ad operatori in un nuovo, più grande spazio di Hilbert.*

Sarà bene chiarire subito i limiti di questa analogia. Innanzitutto, come presto vedremo, nel caso non relativistico il formalismo della seconda quantizzazione è del tutto equivalente a quello ordinario di prima quantizzazione. Certamente non è la funzione d'onda come vettore dello spazio di Hilbert che diventa un operatore. In effetti, l'equazione di Schroedinger, come versione infinitesima di una traslazione temporale sul vettore di stato, è necessariamente unica. Tuttavia, è possibile esprimere l'evoluzione temporale in termini di una equazione generalmente non lineare, molto simile all'equazione di Schroedinger ad una particella, dove l'incognita è effettivamente un operatore, l'operatore di campo *(vedi oltre). Questa è la situazione tipica nel caso relativistico, poiché l'equivalente descrizione alla Schroedinger, con funzioni d'onda di un numero fissato di particelle identiche, di fatto non esiste nemmeno.*

12.3.1. Lo spazio di Fock. *Il punto centrale della seconda quantizzazione è l'abbandono dello spazio di Hilbert ad un numero fissato di particelle identiche. Consideriamo inizialmente lo spazio* $\mathcal{H}^{(\mathsf{N})}$ *di* N *particelle distinguibili. Lo spazio degli stati con* N *non fissato è lo spazio di*

Fock:

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}^{(N)} ,$$

cioè la somma diretta di tutti gli $\mathcal{H}^{(N)}$ *con variabile sugli interi non-negativi* [1]*. Per definizione* $\mathcal{H}^{(0)} \equiv \mathbb{C}$ *è lo spazio degli stati senza particelle, che possiede, come unico vettore di base, il cosiddetto* **stato di vuoto** $|0\rangle$ *. Inoltre, sottospazi* $\mathcal{H}^{(N_1)}$ *e* $\mathcal{H}^{(N_2)}$ *con un numero di particelle diverso,* $N_1 \neq N_2$ *, sono per definizione ortogonali. In termini delle basi canoniche* $|\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N\rangle$ *,* $N = 0, 1, 2, \ldots$ *, i vettori di* $\mathcal{F}_\zeta$ *hanno dunque la forma generale*

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N} \Psi(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N)\, |\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N\rangle \\ &= \Psi_0\, |0\rangle + \sum_{\alpha} \Psi(\alpha)\, |\alpha\rangle + \sum_{\alpha_1,\alpha_2} \Psi(\alpha_1, \alpha_2)\, |\alpha_1, \alpha_2\rangle + \ldots \end{aligned} \tag{12.11}$$

e per ipotesi $\langle\Psi|\Psi\rangle < \infty$ *. Qualora la base* $|\alpha\rangle$ *di* $\mathcal{H}$ *sia ortonormale, la norma di* $|\psi\rangle$ *si scrive*

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N} |\Psi(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N)|^2 .$$

Lo spazio di Fock è manifestamente uno spazio di Hilbert separabile non appena $\mathcal{H}$ *è separabile (il che è assunto per ipotesi in meccanica quantistica).*

Possiamo ora imporre il principio di indistinguibilità sullo spazio di Fock $\mathcal{F}$ *, che diventa quindi lo spazio di Fock bosonico (* $\zeta = 1$ *) o fermionico (* $\zeta = -1$ *):*

$$\mathcal{F}_\zeta = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_\zeta^{(N)} .$$

Per ottenere l'espressione analoga alla (12.11) *è sufficiente appendere una* ζ *alla base canonica in accordo con* (11.12)*. Per quanto riguarda la norma di* $|\Psi\rangle$ *, è chiaro che* $|\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N\rangle_-$ *, avendo necessariamente tutti gli* α_j *distinti, risulta ortonormale non appena* $|\alpha\rangle$ *è ortonormale, per cui*

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum\nolimits_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N \\ \text{tutti distinti}}} |\Psi(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N)|^2$$

è la norma in $\mathcal{F}_-$ *per* $|\alpha\rangle$ *ortonormale. Nel caso bosonico si ottiene invece*

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N} \left[\prod_{\alpha} n(\alpha)!\right] |\Psi(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N)|^2 \tag{12.12}$$

[1] Dato che si tratta di una somma diretta *infinita* si intende che lo spazio di Fock è completato nel senso di Cauchy.

dove $n(\alpha)$ *è il numero di volte che* α *compare in* $(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N)$ *(vale ovviamente la consueta regola* $0! = 1$*). La validità di questa espressione risulterà ovvia tra breve.*

Sullo spazio di Fock risulta immediatamente definito come osservabile (che commuta senz'altro con tutte le permutazioni) il numero di particelle $\hat{N}$*, il quale ha come spettro gli interi non negativi. Il settore di* $\mathcal{F}$ *o* $\mathcal{F}_\zeta$ *corrispondente all'autovalore* N *di* $\hat{N}$ *è lo spazio di Hilbert originario* $\mathcal{H}^{(N)}$ *o* $\mathcal{H}_\zeta^{(N)}$*. Nel seguito indicheremo semplicemente con* N *anche l'operatore.*

12.3.2. Operatori di creazione e distruzione. *Sullo spazio di Fock* $\mathcal{F}_\zeta$ *possiamo ora introdurre operatori lineari di fondamentale importanza per il formalismo della seconda quantizzazione: gli* **operatori di creazione e distruzione** *di una particella. Per dare la loro definizione, possiamo limitarci all'azione sulle basi canoniche* $|\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N\rangle_\zeta$*,* $N = 0, 1, 2, \ldots$*. Questa azione si estende poi per linearità ad un insieme denso in* $\mathcal{F}_\zeta$*. Dunque, ad ogni vettore* $|\phi\rangle$ *dello spazio* $\mathcal{H}$ *di singola particella facciamo corrispondere l'operatore di creazione* $a^\dagger(\phi)$ *definito da*

$$a^\dagger(\phi)\,|\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N\rangle_\zeta = \sum_{\alpha_{N+1}} |\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_{N+1}\rangle_\zeta \,\langle\alpha_{N+1}|\phi\rangle \ .$$

Il corrispondente operatore di distruzione $a(\phi)$ *è definito come l'operatore aggiunto di* $a^\dagger(\phi)$ *che annichila il vuoto, ovvero*

$$a(\phi)\,|0\rangle = 0 \ , \quad \forall\, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$$

$$a(\phi)\,|\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N\rangle = \sum_{j=1}^{N} \zeta^{N-j} \,\langle\phi|\alpha_j\rangle \,\big|\alpha_1, \ldots, \alpha_{j-1}, \alpha_{j+1}, \ldots \alpha_N\big\rangle_\zeta \ .$$

PROBLEMA 12.3-7 []Si verifichi che effettivamente $a(\phi)^\dagger = a^\dagger(\phi)$.

Si noti che, per costruzione, l'applicazione $|\phi\rangle \mapsto a^\dagger(\phi)$ *è lineare:*

$$a^\dagger(\lambda\,|\phi\rangle + \lambda'\,|\phi'\rangle) = \lambda a^\dagger(\phi) + \lambda' a^\dagger(\phi') \ ,$$

per cui risulta naturale introdurre una base $\{a^\dagger(\alpha)\}$ *per gli operatori di creazione in corrispondenza di una base* $\{|\alpha\rangle\}$ *in* $\mathcal{H}$

$$a^\dagger(\phi) = a^\dagger\left(\sum_\alpha |\alpha\rangle\,\langle\alpha|\phi\rangle\right) = \sum_\alpha a^\dagger(\alpha)\,\langle\alpha|\phi\rangle \ .$$

L'analoga relazione per $a(\phi)$ *si ottiene quindi per coniugazione. Un cambiamento di base in* $\mathcal{H}$*,*

$$|\alpha\rangle = \sum_\beta |\beta\rangle\,\langle\beta|\alpha\rangle \ ,$$

induce lo stesso cambiamente di base per gli operatori di creazione e distruzione:

$$\mathfrak{a}^\dagger(\alpha) = \sum_\beta \mathfrak{a}^\dagger(\beta)\,\langle\beta|\,\alpha\rangle\ , \quad \mathfrak{a}(\alpha) = \sum_\beta \langle\alpha|\,\beta\rangle\,\mathfrak{a}(\beta)\ . \tag{12.13}$$

Determiniamo ora le proprietà di commutazione di $\mathfrak{a}$ *e* $\mathfrak{a}^\dagger$*. È sufficiente considerare l'azione dei commutatori sui vettori della base canonica di* $\mathcal{F}_\zeta$*, che conviene scegliere definita in termini della stessa base* $\{|\alpha\rangle\}$ *di* $\mathcal{H}$ *usata per* $\mathfrak{a}$ *e* $\mathfrak{a}^\dagger$*. Allora*

$$\begin{aligned}\mathfrak{a}^\dagger(\alpha)\mathfrak{a}^\dagger(\alpha')\,|\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N\rangle_\zeta &= \left|\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N,\alpha,\alpha'\right\rangle_\zeta \\ &= \zeta\left|\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N,\alpha',\alpha\right\rangle_\zeta \\ &= \zeta\mathfrak{a}^\dagger(\alpha')\mathfrak{a}^\dagger(\alpha)\,|\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N\rangle_\zeta\ .\end{aligned}$$

Ovvero, per linearità, completezza e coniugazione,

$$\mathfrak{a}^\dagger(\alpha)\mathfrak{a}^\dagger(\alpha') = \zeta\mathfrak{a}^\dagger(\alpha')\mathfrak{a}^\dagger(\alpha)\ , \quad \mathfrak{a}(\alpha)\mathfrak{a}(\alpha') = \zeta\mathfrak{a}(\alpha')\mathfrak{a}(\alpha)\ . \tag{12.14}$$

Analogamente si ottiene

$$\begin{aligned}\mathfrak{a}(\alpha)\mathfrak{a}^\dagger(\alpha')\,|\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N\rangle_\zeta &= \mathfrak{a}(\alpha)\left|\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N,\alpha'\right\rangle_\zeta \\ &= \sum_{n=1}^{N+1}\zeta^{N+1-n}\,\langle\alpha|\,\alpha_n\rangle\,|\alpha_1,\ldots,\alpha_{n-1},\alpha_{n+1},\ldots\alpha_{N+1}\rangle_\zeta\end{aligned}$$

da una parte, mentre dall'altra vale

$$\begin{aligned}&\mathfrak{a}^\dagger(\alpha')\mathfrak{a}(\alpha)\,|\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N\rangle_\zeta = \\ &\sum_{n=1}^{N}\zeta^{N-n}\,\langle\alpha|\,\alpha_n\rangle\,\mathfrak{a}^\dagger(\alpha')\,|\alpha_1,\ldots,\alpha_{n-1},\alpha_{n+1},\ldots\alpha_N\rangle_\zeta \\ &= \sum_{n=1}^{N}\zeta^{N-n}\,\langle\alpha|\,\alpha_n\rangle\,|\alpha_1,\ldots,\alpha_{n-1},\alpha_{n+1},\ldots\alpha_{N+1}\rangle_\zeta\ ,\end{aligned}$$

dove si è posto $\alpha_{N+1} \equiv \alpha'$*. Quindi*

$$\mathfrak{a}(\alpha)\mathfrak{a}^\dagger(\alpha') - \zeta\mathfrak{a}^\dagger(\alpha')\mathfrak{a}(\alpha) = \langle\alpha|\,\alpha'\rangle \tag{12.15}$$

Le Eq. (12.14) *e* (12.15) *costituiscono le cosiddette* **regole di commutazione (anti-commutazione) canoniche** *della seconda quantizzazione, e giocano un ruolo assolutamente centrale nella teoria quantistica dei campi e dei sistemi a molti corpi.*

12.3.3. Rappresentazione "numero-di-occupazione". *Il procedimento fin qui seguito (una particella → tante particelle → spazio di Fock di un numero illimitatamente variabile di particelle → operatori di creazione e distruzione → regole di (anti-)commutazione canoniche) può perfettamente essere invertito. Supponiamo che sia definito, su un certo spazio di Hilbert* $\mathcal{V}$ *, un insieme di operatori lineari* $\{a(\alpha),\, a^\dagger(\alpha)\}$ *indicizzato come una base* $\{|\alpha\rangle\}$ *di un altro spazio di Hilbert* $\mathcal{H}$ *separabile. Di fatto, l'indice generalizzato* α *può essere scelto contabile, ed essere quindi indicizzato a sua volta dagli interi* $j = 0, 1, 2, \ldots$ *, per cui l'unica sostanziale differenza sta tra il caso in cui* $\mathcal{H}$ *è di dimensione finita ed il caso in cui non lo è. Inoltre, siano assegnate per* $a_j \equiv a(\alpha_j)$ *e* $a_j^\dagger \equiv a^\dagger(\alpha_j)$ *le regole di (anti-)commutazione canoniche* (12.14) *e* (12.15)*. Per maggior semplicità, e senza alcuna perdita di generalità, possiamo anche assumere che* $\{|\alpha_j\rangle\}$ *sia ortonormale, per cui le regole canoniche si scrivono*

$$\left[a_j\,,\, a_k\right]_{-\zeta} = \left[a_j^\dagger\,,\, a_k^\dagger\right]_{-\zeta} = 0\,, \quad \left[a_j\,,\, a_k^\dagger\right]_{-\zeta} = \delta_{jk}\,, \tag{12.16}$$

dove abbiamo introdotto, un po' pedantemente, il nuovo simbolo $[A, B]_x = AB + xBA$ *.*

Non può certamente sfuggire al lettore che le relazioni (12.16) *coincidono, nel caso bosonico* $\zeta = 1$ *, con le regole di commutazione di una collezione di oscillatori monodimensionali indipendenti (la dinamica non è ancora specificata, per cui non si tratta necessariamente di oscillatori armonici). Possiamo allora applicare a ciascun oscillatore l'analisi usuale: introduciamo gli operatori numero* $a_j^\dagger a_j$, $j = 0, 1, 2, \ldots$, *per cui*

$$\left[a_j^\dagger a_j,\, a_k\right] = -\delta_{jk} a_k\,, \quad \left[a_j^\dagger a_j,\, a_k^\dagger\right] = \delta_{jk} a_n^\dagger \tag{12.17}$$

Assumendo *quindi l'esistenza di un vettore* $|0\rangle$ *, il vuoto, annichilato da tutti i distruttori* a_j *,*

$$a_j\,|0\rangle = 0\,, \quad \forall j\,, \tag{12.18}$$

possiamo ricostruire il sottospazio di $\mathcal{V}$ *corrispondente al vuoto* $|0\rangle$ *come lo sviluppo lineare dei vettori*

$$|n_0, n_1, n_2, \ldots\rangle \equiv \prod_j \frac{(a_j^\dagger)^{n_j}}{\sqrt{n_j!}}\,|0\rangle \tag{12.19}$$

dove n_j *rappresenta l'autovalore, necessariamente intero non negativo, dell'operatore numero* $a_j^\dagger a_j$ *. Si noti che, grazie alle regole di commutazione canoniche ed alla proprietà fondamentale del vuoto* (12.18)*, i vettori* (12.19) *sono propriamente ortonormalizzati (si è inteso che* $\langle 0|0\rangle = 1$ *), per cui questo sottospazio di* $\mathcal{V}$ *risulta effettivamente dotato di un prodotto scalare positivo definito.*

In effetti, possiamo facilmente riconoscere in (12.19)*, a meno di un fattore di proporzionalità ben preciso, i vettori della base canonica di* $\mathcal{H}_+^{(N)}$*, dove* $N = \sum_j n_j$ *(purché tale somma sia finita). Infatti lo sviluppo lineare dei vettori* $a_j^\dagger |0\rangle = |\alpha_j\rangle$ *coincide per costruzione con* $\mathcal{H}$ *e*

$$\sqrt{\prod_j n_j!}\, |n_0, n_1, n_2, \ldots\rangle = |\alpha_{j_1}, \alpha_{j_2}, \ldots, \alpha_{j_N}\rangle_+ \ . \tag{12.20}$$

Per ipotesi, in $|\alpha_{j_1}, \ldots, \alpha_{j_N}\rangle_+$ *l'indice* α_j *compare* n_j *volte. La simmetrizzazione totale è automatica dato che l'ordinamento dei creatori in* (12.19) *è irrilevante. L'Eq.* (12.20) *mostra anche qual è il fattore di normalizzazione giusto per la base canonica di* N *bosoni e dimostra la correttezza della formula* (12.12) *per la norma di un generico vettore di* $\mathcal{F}_+$*. La ricostruzione delo spazio di Fock* $\mathcal{F}_+$ *è ora completa: esso consiste nel sottospazio di* $\mathcal{V}$ *caratterizzato dallo stato di vuoto* $|0\rangle$ *e completato nel senso di Cauchy a partire da stati con* N, arbitrariamente grandi ma finiti[2].

La base $\{|n_0, n_1, n_2, \ldots\rangle\ ,\ n_j = 0, 1, 2, \ldots\}$ *definisce la cosiddetta* **rappresentazione del numero di occupazione***:* n_j *è il numero di bosoni che si trovano nello stato* $|\alpha_j\rangle$*. L'operatore numero totale di particelle* N *si scrive quindi*

$$N = \sum_j a_j^\dagger a_j \equiv \sum_\alpha a^\dagger(\alpha) a(\alpha)\ . \tag{12.21}$$

È chiaro che N *assume sempre un'espressione formalmente identica per qualunque base ortonormale* $\{|\alpha\rangle\}$ *di* $\mathcal{H}$*. L'espressione* (12.21) *è soltanto un esempio di come un operatore fondamentale possa essere scritto in termini di* a *e* $a^\dagger$*. In effetti, tutti gli operatori lineari (e quindi anche tutte le osservabili) sullo spazio di Fock* $\mathcal{F}_\zeta$ *si possono scrivere come combinazioni lineari di prodotti di* a *e* $a^\dagger$*. Ovvero, l'insieme degli* $a(\alpha)$ *e* $a^\dagger(\alpha)$ *genera l'intera algebra degli operatori lineari su* $\mathcal{F}_\zeta$*. Altri importanti esempi di questa fondamentale proprietà saranno presentati più avanti.*

La rappresentazione del numero di occupazione esiste naturalmente anche nel caso fermionico. Se $\zeta = -1$ *le Eq.* (12.16) *esprimono le regole di anticommutazione canonica. Esse implicano, in particolare, la nilpotenza*

[2] È opportuno sottolineare che quando le coppie canoniche sono infinitamente numerose tale ricostruzione non è affatto unica. Al contrario, possono esserci infiniti sottospazi ortogonali di Fock all'interno di $\mathcal{V}$. Essi differiscono nella scelta del vuoto e sono ortogonali nonappena i rispettivi vuoti sono ortogonali. Di fatto essi costituiscono rappresentazioni inequivalenti delle regole di (anti-)commutazione canoniche. Si noti che il teorema di Von Neumann enunciato al §5.2.3 vale per un numero finito di coppie canoniche. Va detto inoltre che esistono anche rappresentazioni non di Fock delle regole di (anti-)commutazione canoniche, nelle quali non c'è alcun vettore di vuoto.

dei creatori e distruttori

$$a_j{}^2 = 0 = a_j^\dagger{}^2 ,$$

per cui, una volta assunta l'esistenza del vuoto $|0\rangle$ *annichilato da tutti i distruttori, lo spazio vettoriale associato allo stato* $|\alpha_j\rangle$ *è bidimensionale: se* $n_j = 0$ *esso non è occcupato da un fermione; se* $n_j = 1$ *esso è occupato.* n_j *è l'autovalore del operatore numero dello stato* $|j\rangle$ *, che si scrive* $a_j^\dagger a_j$ *come nel caso bosonico e soddisfa alle stesse regole di* commutazione (12.17) *con creatori e distruttori. Anche l'operatore "numero totale di fermioni"* N *mantiene quindi la stessa espressione* (12.21)*. La totale antisimmetria degli stati fermionici, così come la totale simmetria di quelli bosonici è una conseguenza banale delle regole di (anti-)commutazione canoniche. Di fatto, nella rappresentazione del numero di occupazione non è più necessario sottolineare le proprietà di simmetria: il principio di indistinguibilità è implicito nelle regole di (anti-)commutazione canoniche della seconda quantizzazione.*

12.3.4. Operatori di campo. *Come nel formalismo ordinario di prima quantizzazione, anche nel nuovo formalismo appena introdotto la rappresentazione della posizione gioca un ruolo importante, anche se concettualmente diverso. Innanzitutto, conviene adottare il simbolo specifico* ψ *per la base degli operatori di creazione e distruzione nella rappresentazione* $\{|\mathbf{x}\rangle\}$ *(per semplicità omettiamo eventuali gradi di libertà interni), in accordo con la convenzione più diffusa: dunque, formalmente* $\psi^\dagger(\mathbf{x})$ *"crea" una particella in* $\mathbf{x}$ *e* $\psi(\mathbf{x})$ *ivi la "distrugge"*[3]*. Quindi, se come al solito* $\{|\alpha\rangle\}$ *indica una base "onesta" in* $\mathcal{H} \sim \mathcal{L}_2(\Lambda)$ *(la cui scelta in generale dipende dal problema fisico in questione), avremo*

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_\alpha \langle \mathbf{x}|\,\alpha\rangle\, a(\alpha) \ , \quad \psi^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_\alpha a^\dagger(\alpha)\,\langle \alpha|\mathbf{x}\rangle \ , \tag{12.22}$$

in accordo con la regola generale (12.13)*. Per quanto riguarda le regole di (anti-)commutazione canoniche, esse si scrivono ora*

$$\begin{aligned} [\psi(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{y})]_{-\zeta} &= 0 = \left[\psi^\dagger(\mathbf{x}), \psi^\dagger(\mathbf{y})\right]_{-\zeta} \\ \left[\psi(\mathbf{x}), \psi^\dagger(\mathbf{y})\right]_{-\zeta} &= \delta(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \ . \end{aligned} \tag{12.23}$$

$\psi(\mathbf{x})$, $\psi^\dagger(\mathbf{x})$ *e gli operatori composti con essi, per ragioni che diverranno presto chiare, prendono generalmente il nome di* operatori di campo.

Consideriamo ad esempio l'operatore composto autoaggiunto

$$\rho(\mathbf{x}) = \psi^\dagger(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) \ .$$

[3]La scelta dello stesso simbolo solitamente riservato alle funzioni d'onda corrisponde proprio alla terminologia "seconda quantizzazione".

In base alla relazione (12.21)*, si ottiene*

$$\int_\Lambda \rho(\mathbf{x}) = N \ ,$$

per cui risulta naturale considerare $\rho(\mathbf{x})$ *come l'osservabile* densità di particelle *nel punto* $\mathbf{x}$*. Possiamo verificare questa identificazione determinando l'equivalente di* $\rho(\mathbf{x})$ *nel formalismo di prima quantizzazione. Consideriamo uno stato di* $\mathcal{F}_\zeta$ *con un numero* N fissato *di particelle:*

$$|\Psi\rangle = \int_\Lambda d^{3N}x\, \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N) \left[\prod_{j=1}^{N} \psi^\dagger(\mathbf{x}_j)\right] |0\rangle \ . \tag{12.24}$$

L'azione di $\rho(\mathbf{x})$ *su* $|\Psi\rangle$ *induce, attraverso le regole di (anti-)commutazione canonica* (12.23)*, un'azione sulla funzione d'onda* $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N)$*:*

$$\rho(\mathbf{x})\, |\Psi\rangle = \left|\Psi'\right\rangle$$

$$\Psi'(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N) = \sum_{j=1}^{N} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N) \ .$$

Vale quindi la corrispondenza

$$\rho(\mathbf{x}) \longrightarrow \sum_{j=1}^{N} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{q}_j) \ .$$

Si noti che il membro di destra è proprio la densità nel senso intuitivo. Essendo una funzione simmetrica delle $\mathbf{q}_j$*, esso commuta con tutte le permutazioni ed è quindi osservabile. Naturalmente è anche una espressione singolare, cui non corrisponde un'operazione fisicamente attuabile. Se però consideriamo*

$$\rho_w = \int_w d^3x\, \psi^\dagger(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \ ,$$

dove w *è un volumetto centrato in una particolare posizione, le cui dimensioni dipendono di fatto dall'apparato di misura, non sorgono problemi neppure dal punto di vista operativo. Se confrontiamo un'espressione come questa con il suo analogo di prima quantizzazione, dove* $\psi(\mathbf{x})$ *è la funzione d'onda di una ben precisa particella (o meglio, un ben preciso punto materiale), possiamo apprezzare il salto concettuale della seconda quantizzazione: da probabilità di trovare la particella nel volume elementare* d^3x*, il c-numero* $\overline{\psi(\mathbf{x})}\psi(\mathbf{x}) d^3x$ *viene promosso in* $\psi^\dagger(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) d^3x$*, il q-numero (osservabile) "numero di particelle in* d^3x*" (si ricordi che l'operatore aggiunto è l'analogo del complesso coniugato per i numeri complessi). In particolare, se consideriamo stati del tipo* (12.24) *con una sola particella, descrivibili mediante la funzione d'onda normalizzata* $\Psi(\mathbf{x})$*,*

vediamo che la densità di probabilità di trovare la particella in un dato punto, $\overline{\Psi(\mathbf{x})}\Psi(\mathbf{x})$ *, coincide con il valore di aspettazione dell'operatore densità* $\rho(\mathbf{x})$ *.*

La corrispondenza appena descritta si estende naturalmente ad altre grandezze dinamiche fondamentali.Per esempio l'osservabile

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = \frac{\hbar}{2m\,i}\left[\psi^\dagger(\mathbf{x})\nabla\psi(\mathbf{x}) - \left(\nabla\psi^\dagger(\mathbf{x})\right)\psi(\mathbf{x})\right]$$

che è formalmente identica alla corrente di probabilità del punto materiale quantomeccanico (vedi §5.2.3), va ora identificata con la densità di velocità del sistema di particelle identiche. Lasciamo al lettore, come utile esercizio, verificare che effettivamente, sotto la restrizione al settore $\mathcal{H}_\zeta^{(N)}$ *con* N *particelle,*

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) \longrightarrow \frac{1}{2m}\sum_{j=1}^{N}\left[\mathbf{p}_j\delta(\mathbf{x}-\mathbf{q}_j) + \delta(\mathbf{x}-\mathbf{q}_j)\mathbf{p}_j\right] .$$

Si noti che nello stato ad una particella descritto da $\Psi(\mathbf{x})$ *, l'operatore* $\mathbf{j}(\mathbf{x})$ *assume un valore di aspettazione identico alla corrente di probabilità.*

L'integrazione di $\mathbf{j}(\mathbf{x})$ *sullo spazio occupato dal sistema produce evidentemente l'operatore che corrisponde al momento totale del sistema. Analogamente, l'operatore (formalmente) autoaggiunto*

$$\begin{aligned} H = &\int_\Lambda d^3x\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^\dagger(\mathbf{x})\cdot\nabla\psi(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\psi^\dagger(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})\right] \\ &+ \int_\Lambda d^3x\, d^3y\, \psi^\dagger(\mathbf{x})\psi^\dagger(\mathbf{y})V(\mathbf{x},\mathbf{y})\psi(\mathbf{y})\psi(\mathbf{x}) \end{aligned} \tag{12.25}$$

rappresenta la versione secondo-quantizzata dell'Hamiltoniana di un sistema di particelle identiche non-relativistiche in un campo esterno $V(\mathbf{x})$ *e con interazione a due corpi* $V(\mathbf{x},\mathbf{y})$ *(si noti che solo la parte simmetrica di questo potenziale sopravvive alla doppia integrazione in* (12.25)*, per cui esso si può assumere simmetrico fin dal principio, come richiesto dall'identità delle particelle). Si può infatti verificare (esercizio!) che su stati con* N *particelle del tipo* (12.24)*,*

$$H\,|\Psi\rangle = |h_N\Psi\rangle$$

dove h_N *è l'operatore differenziale di prima quantizzazione*

$$h_N = \sum_{j=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\,\triangle_j + V(\mathbf{x}_j)\right) + \sum_{j<k}V(\mathbf{x}_j,\mathbf{x}_n)$$

(si assumano condizioni al contorno su Λ *tali da rendere il Laplaciano* $\triangle$ *autoaggiunto). Possiamo ora scrivere le equazioni del moto per gli*

operatori di campo, ad esempio

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = [\psi(x,t), H] \tag{12.26}$$
$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(x)\right]\psi(x,t) + \int_\Lambda d^3y\, \psi^\dagger(y,t)\, V(x,y)\, \psi(y,t)\psi(x,t)$$

dove si è fatto uso delle regole canoniche (12.23)*, della forma esplicita di* H (12.25) *e di una integrazione per parti. Di fatto, questa equazione (con la sua coniugata) definisce interamente la dinamica, poiché ogni altro operatore si può scrivere in termini di* ψ *e* $\psi^\dagger$*. Anche se la descrizione dell'evoluzione temporale così ottenuta è manifestamente quella di Heisenberg, si può dire che* (12.26) *rappresenta una versione operatoriale e non lineare dell'equazione di Schroedinger per la funzione d'onda di una particella. In particolare, in assenza di interazione tra le particelle,* $V(x,y) = 0$*, le due equazioni sono formalmente identiche.*

PROBLEMA 12.3-8 []Data una Hamiltoniana del tipo (12.25), si verifichi che la densità di particelle e ls densità di velocità soddisfano all'equazione operatoriale di continuità (conservazione locale delle particelle)

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) + \nabla\cdot j(x,t) = 0$$

Essa rappresenta la versione di seconda quantizzazione dell'equazione della conservazione locale della probabilità (5.40).

In effetti, nel caso di particelle non-interagenti, la soluzione generale dell'equazione di Schroedinger per una particella fissa interamente anche la soluzione dell'equazione di Heisenberg per il campo. È sufficiente considerare come base $\{|\alpha\rangle\}$ *in* $\mathcal{H}$ *la base ortonormale delle autofunzioni* $u_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle$ *dell'operatore di Schroedinger*[4]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(x)\right]u_\alpha(x) = \hbar\omega_\alpha u_\alpha(x)$$

Sostituendo quindi lo sviluppo (12.22) *nell'Hamiltoniana* (12.25) *si ottiene*

$$\begin{aligned} H &= \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha a^\dagger(\alpha)a(\alpha) \\ &+\tfrac{1}{2}\sum_{\alpha_1\alpha_2\alpha_1'\alpha_2'} a^\dagger(\alpha_1)a^\dagger(\alpha_2)\,\langle\alpha_1\alpha_2|V|\alpha_1'\alpha_2'\rangle \end{aligned} \tag{12.27}$$

dove, per costruzione

$$\langle\alpha_1\alpha_2|V|\alpha_1'\alpha_2'\rangle = \int_\Lambda d^3x\, d^3y\, u_{\alpha_1}(x)^* u_{\alpha_2}(y)^* V(x,y) u_{\alpha_1'}(x) u_{\alpha_2'}(y)$$

[4]Conviene solitamente considerare il sistema confinato in un dominio Λ di volume finito, con opportune condizioni al contorno, onde evitare la possibilità di uno spettro continuo. Il limite di volume infinito va preso al momento opportuno.

In assenza di interazione tra le particelle, l'Hamitoniana (12.27) *si riduce alla somma di infiniti oscillatori armonici disaccoppiati. In tal caso*

$$a(\alpha, t) = a(\alpha)e^{-i\omega_\alpha t}\,, \quad a^\dagger(\alpha, t) = a^\dagger(\alpha)e^{i\omega_\alpha t}$$

per cui

$$\psi(x, t) = \sum_\alpha a(\alpha)u_\alpha(x)e^{-i\omega_\alpha t}$$

è la soluzione dell'equazione del moto per il campo. La struttura di questa soluzione è identica a quella dell'equazione di Schroedinger per una particella: la novità consiste nel fatto che i coefficienti dello sviluppo $a(\alpha)$ *sono operatori e non c-numeri. Si noti che, nel caso di particelle libere, ovvero qualora anche il campo esterno* $V(x)$ *si annulli, le autofunzioni della base* $\{|\alpha\rangle\}$ *sono le onde piane* $e^{ik\cdot x}$ *e quindi* $\omega_\alpha = \hbar k^2/2m$ *risulta positiva definita. Lo stesso dicasi nel caso di un potenziale esterno repulsivo. In questo caso il vuoto* $|0\rangle$ *coincide con lo stato fondamentale del sistema.*

L'espressione (12.27) *è di fondamentale importanza. Essa mostra come l'interazione a due corpi tra le particelle corrisponda all'accoppiamento* anarmonico quartico *fra gli oscillatori. Non si tratta tuttavia del più generale termine quartico, in quanto l'Hamiltoniana , per commutare con l'operatore* N *, deve contenere lo stesso numero di creatori e distruttori. In modelli relativistici di interazione tra particelle quantomeccaniche, sono in generale presenti anche termini che non commutano con* N *. In ogni caso, espressioni come* (12.27) *rappresentano la base per la teoria delle perturbazioni per sistemi di particelle identiche. All'ordine zero, l'Hamiltoniana è immediatamente diagonalizzata nella rappresentazione numero-di-occupazione. Gli ordini successivi corrispondono a potenze fissate del potenziale di interazione* $V(x, y)$ *e si possono organizzare in modo molto efficiente e sistematico grazie ancora una volta alle regole di (anti-)commutazione canoniche. La rappresentazione grafica dei vari contributi a ciascun ordine perturbativo prende il nome di* **diagrammi di Feynman**.

Abbiamo dunque verificato che il formalismo della seconda quantizzazione è equivalente a quello convenzionale, basato sul concetto di funzione d'onda di tante particelle identiche, qualora l'Hamiltoniana di campo sia della forma (12.25). *La caratteristica saliente di questo tipo di Hamiltoniane è che esse commutano con l'operatore numero,* $[H, N] = 0$ *, cioè il numero delle particelle è conservato nel tempo. Il nuovo formalismo è però più efficiente ed economico, offrendo la possibilità di organizzare in modo semplice e sistematico la teoria delle perturbazioni e di studiare efficacemente il cosiddetto* limite termodinamico. *In tale limite sono rilevanti solo gli stati a densità finita, caratterizzati da un numero medio di*

particelle $\langle \mathsf{N} \rangle$ *proporzionale al volume del dominio* Λ *che tende all'infinito. Si tratta di un passaggio al limite fondamentale nella descrizione statistica dei sistemi macroscopici. La trattazione di questi aspetti esula tuttavia dagli scopi di questo libro.*

Occorre sottolineare, d'altra parte, che l'apparato formale della seconda quantizzazione diventa insostituibile e rivela appieno la sua diversa base concettuale rispetto a quello convenzionale quando la dinamica è tale per cui il numero delle particelle non è conservato nel tempo. Questa è la situazione dominante nella fisica relativistica: i fotoni, i quanti bosonici del campo elettromagnetico, sono continuamente creati e distrutti a tutte le scale, dal macrocosmo al microcosmo; altre particelle elementari, come gli elettroni, possono essere create e distrutte quando le densità di energia in gioco sono sufficientemente grandi. Per quanto riguarda le basse energie *(energie alle quali gli effetti relativistici come la produzione di particelle massive sono assenti), se consideriamo alla stregua di particelle identiche anche i* **fononi**, *i quanti di vibrazione meccanica dei sistemi macroscopici, possiamo affermare che ogni interazione degli stessi è accompagnata dalla creazione (quasi sempre) e dalla distruzione (più raramente) di fononi. Per definizione dunque, in tutti questi casi non è possibile una descrizione efficace degli stati quantomeccanici in termini di funzioni d'onda di un numero fissato di particelle.*

In effetti, la descrizione quantomeccanica dei sistemi fisici in termini di particelle, elementari e non, come costituenti microscopici degli stessi, possiede una versione duale, *dove gli oggetti fondamentali sono* campi quantizzati. *In un solido cristallino, ad esempio, una configurazione classica del campo è individuata dagli spostamenti dalla posizione d'equilibrio di ciascun costituente elementare del solido. Questo campo è quantizzato, cioè un* q*-numero piuttosto che un c-numero, perché tale è la posizione di ciascun costituente microscopico (atomo o molecola). Nel caso dei campi relativistici, come quello elettromagnetico o quello dell'elettrone, in realtà non è possibile parlare di costituenti elementari: possiamo solo affermare che esistono gradi di libertà quantomeccanici, analoghi agli spostamenti locali del solido cristallino, per ciascun punto dello spazio, o meglio, per ciascuna parte di spazio con dimensioni molto più piccole delle più piccole distanze finora sondate. I modi fondamentali di vibrazione di questi gradi di libertà sono quantizzati, ed i quanti sono le particelle (elementari e non) osservate in natura. La formalizzazione di questo punto di vista costituisce la teoria relativistica dei campi quantizzati, e certamente va oltre i nostri scopi presenti. È comunque importante osservare che in essa la localizzazione esatta di particelle massive in un preciso punto dello spazio e del tempo non è più possibile nemmeno al livello concettuale (com'è invece nell'impianto teorico della prima quantizzazione): più piccola la*

regione spazio-temporale di localizzazione, piú grandi le energie ed i momenti trasferiti in gioco, finché la produzione di nuove particelle identiche a quella originariamente da localizzare rende l'intera operazione priva di significato.

Nel caso bosonico si può identificare piuttosto agevolmente un campo classico di cui la seconda quantizzazione, così come è stata qui introdotta, automaticamente definisce un analogo quantomeccanico. In effetti, la collezione infinita di oscillatori quantomeccanici descritti da $a(\alpha)$ *e* $a^\dagger(\alpha)$ *è direttamente interpretabile come un campo quantizzato. A tale scopo, è sufficiente considerare gli operatori formalmente autoaggiunti e mutualmente commutanti* $\varphi(\alpha) = [a(\alpha) + a^\dagger(\alpha)]/\sqrt{2}$. *Essi formano un insieme completo di osservabili di tipo posizione, che possiamo considerare come coordinate del campo, con* α *come indice generalizzato*[5]. *Al livello classico esse soddisfano a parentesi di Poisson canoniche con variabili di tipo momento* $\chi(\alpha)$. *Dopo la quantizzazione, i momenti coniugati sono* $\chi(\alpha) = -i\hbar[a(\alpha) - a^\dagger(\alpha)]/\sqrt{2}$. *Le regole di commutazione canoniche si scrivono ora*

$$\begin{aligned}\left[\varphi(\alpha), \varphi(\alpha')\right] &= 0 = \left[\chi(\alpha), \chi(\alpha')\right]\\ \left[\varphi(\alpha), \chi(\alpha')\right] &= i\hbar\delta_{\alpha\alpha'}\end{aligned}$$

Cambiamenti di base in $\mathcal{H}$ *e, più in generale, trasformazioni canoniche (tali cioè da preservare le regole* (12.23)*) vanno considerati come casi speciali di riparametrizzazione dello spazio delle fasi del campo. Risulta ora naturale associare a ciascun valore dell'indice generalizzato* α, *cioè a ciascun elemento della base* $\{|\alpha\rangle\}$ *di* $\mathcal{H}$, *una copia di* $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ *(assumendo per semplicità che* $\mathbb{R}$ *sia lo spettro di* $\varphi(\alpha)$*). Come sappiamo (teorema di Von Neumann), in tale spazio tutte le rappresentazioni delle regole di commutazione canoniche per un singolo grado di libertà sono isomorfe a quella in cui* $\varphi(\alpha)$ *è un operatore di moltiplicazione e* $\chi(\alpha) = (i\hbar)^{-1}\partial/\partial\varphi(\alpha)$. *Lo spazio totale degli stati del campo è perciò formalmente costituito dal prodotto diretto di un numero infinito ma numerabile di copie di* $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. *Si tratta di uno spazio lineare di funzioni d'onda con un numero infinito di argomenti, un oggetto generalmente molto difficile da caratterizzare in modo matematicamente preciso (si può dimostrare, ad esempio della sua complessità, che esso contiene infiniti sottospazi di Hilbert non separabili). Un sottospazio di Fock, ad esempio quello da cui siamo precedentemente partiti, è uno spazio di Hilbert separabile e risulta univocamente individuato dallo stato di vuoto.*

[5] Non esiste invece, in generale, un analogo classico degli infiniti oscillatori fermionici descritti dalle regole di anticommutazione canoniche.

12.3.5. La corda vibrante quantistica. *È senz'altro opportuno a questo punto esaminare in dettaglio un esempio dove il campo in questione ha una precisa interpretazione fisica. Si tratta del classico problema della corda vibrante. Abbiamo già avuto modo di studiare questo sistema fisico nel §4.1.1 Ricapitoliamo i punti fondamentali, adattando la notazione al contesto attuale. La variabile dinamica fondamentale è il campo classico* $\eta(x,t)$ *, che descrive lo spostamento al tempo* t *di un punto* x *della corda dalla posizione di equilibrio. Nel formalismo canonico della meccanica classica, lo spazio delle fasi è parametrizzato da* $\eta(x) = \eta(x,0)$ *e dal momento coniugato* $\pi(x) = \rho\partial_t\eta(x,0)$ *, dove* ρ *è la densità di massa della corda.*

Come al §4.1.1 assumiamo che la corda sia di lunghezza L *e fissa agli estremi, per cui*

$$\eta(0,t) = \eta(L,t) = 0\,, \quad \pi(0,t) = \pi(L,t) = 0\,.$$

Conviene ora passare a nuove coordinate $\{(\eta_j,\pi_j); j = 1,2,\ldots\}$ *per lo spazio delle fasi, mediante l'espansione in modi di Fourier*

$$\eta(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{j=1}^{\infty}\eta_j \sin(j\pi x/L)$$
$$\pi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{j=1}^{\infty}\pi_j \sin(j\pi x/L)\,.$$

Si tratta di una trasformazione canonica che preserva le parentesi di Poisson:

$$\{\eta_j\,,\eta_{j'}\} = 0 = \{\pi_j\,,\pi_{j'}\}\,, \quad \{\eta_j\,,\pi_{j'}\} = i\hbar\delta_{jj'}\,.$$

L'equazione lineare delle onde

$$\left(\partial_t^2 - v^2\partial_x^2\right)\eta = 0 \tag{12.28}$$

discende dall'Hamiltoniana

$$H = \int_0^L dx\left[\frac{1}{2\rho}\pi^2 + \frac{\tau}{2}\left(\frac{\partial\eta}{\partial x}\right)^2\right]\,,$$

dove τ *è la tensione della corda e* $v = \sqrt{\tau/\rho}$ *. In termini delle coordinate di Fourier,* H *assume la forma di infiniti oscillatori armonici disaccoppiati*

$$H = \tfrac{1}{2}\sum_{j=1}^{\infty}\left(\pi_j^2 + \omega_j^2\eta_j^2\right)$$

dove si sono scelte unità tali per cui $\rho = 1$ *e si sono introdotte le frequenze proprie* $\omega_j = (\pi v/L)j$ *.*

La quantizzazione procede in modo canonico,

$$[\eta(x)\,,\eta(y)] = 0 = [\pi(x)\,,\pi(y)]$$
$$[\eta(x)\,,\pi(y)] = i\hbar\delta(x-y)\ ,$$

ovvero

$$\left[\eta_j\,,\eta_{j'}\right] = 0 = \left[\pi_j\,,\pi_{j'}\right]\ ,\quad \left[\eta_j\,,\pi_{j'}\right] = i\hbar\delta_{jj'}\ .$$

Con l'usuale sostituzione dell'oscillatore armonico, (vedi §6.2)

$$a_j = \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\pi_j - i\omega\eta_j)\ ,\quad a_j^\dagger = \frac{-i}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\pi_j + i\omega\eta_j)\ ,$$

si ottiene finalmente

$$H = \sum_{j=1}^{\infty}\hbar\omega_j\left(a_j^\dagger a_j + \tfrac{1}{2}\right)\ ,$$

con a_j *e* $a_j^\dagger$ *che soddisfano alle regole di commutazione canoniche. La base* $\{|\alpha\rangle\}$ *naturale è dunque, in questo caso, quella delle onde stazionarie normalizzate* $L^{-1/2}\sin(j\pi x/L)$ *. Vi corrisponde, come spazio di Hilbert ad una particella, lo spazio* $\mathcal{L}_2([0,L])$ *. L'operatore* $a_j^\dagger a_j$ *ha autovalori interi non negativi* n_j *, per cui lo spettro dell'energia si scrive*

$$E_{\{n\}} = \hbar\omega_j\sum_j\left(n_j + \tfrac{1}{2}\right)\ .$$

Data la positività di ω_j *, lo stato fondamentale del sistema coincide con il vuoto* $|0\rangle$ *. L'energia del vuoto vale*

$$E_0 = \tfrac{1}{2}\sum_j\hbar\omega_j\ , \tag{12.29}$$

cioè la somma delle infinite energie di punto zero degli oscillatori armonici che compongono il campo quantizzato. Si tratta evidentemente di una quantità divergente, il primo esempio delle divergenze ultraviolette *(cioè legate al comportamento del modello in questione nel limite di piccole lunghezze d'onda) che costellano la teoria dei campi quantizzati. Dovrebbe tuttavia risultare evidente che l'origine di questa divergenza dell'energia di punto zero è da ricercarsi nell'approssimazione stessa di mezzo continuo. In realtà la corda vibrante non è un sistema continuo, con infiniti gradi di libertà, ma un sistema discreto, fatto di un numero macroscopicamente grande, ma finito, di costituenti elementari (atomi o molecole o, più semplicemente, porzioni indivisibili di corda). In altre parole, esiste nel sistema fisico un taglio (o* cutoff*) naturale* λ_0 *sulle lunghezze d'onda: oscillazioni con lunghezza d'onda più piccola di* λ_0 *non sono possibili. È anche naturale attendersi che per lunghezze d'onda* λ *comparabili a* λ_0 *, la frequenza propria cambi forma, passando dalla semplice dipendenza* $\omega = v\lambda^{-1}$ *,* $\lambda = \lambda_j = L/\pi j$ *, ad una dipendenza più complicata che coinvolge* λ_0 *esplicitamente. Il fatto sostanziale è comunque che l'energia di punto*

zero (12.29) *non è veramente osservabile, se non al prezzo di distruggere la corda stessa.*

PROBLEMA 12.3-9 []Si verifichi che, adottando per la corda il modello di N punti materiali allineati ad una distanza a uno dall'altro, si ottiene la relazione (si veda ad es. [**Ono09**], §1.1.3)

$$\omega_j = 2\,\frac{v}{a}\,\sin\frac{j\pi}{2(N+1)}$$

Quanto vale il *cutoff* λ_0 in questo caso?

12.3.6. Il campo elettromagnetico. *L'analisi appena fatta per la corda vibrante può essere ripetuta senza particolari complicazioni per il campo elettromagnetico. Le equazioni di Maxwell nel vuoto si scrivono, in opportune unità*

$$\nabla\cdot E = 0\,,\quad \nabla\wedge E = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$
$$\nabla\cdot B = 0\,,\quad \nabla\wedge B = \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$

e vanno in genere supplementate da opportune condizioni al contorno, come $\mathbf{n}\wedge\nabla\mathbf{E} = 0 = \mathbf{n}\cdot\mathbf{B}$ *su ogni superficie conduttrice (*$\mathbf{n}$ *è il versore normale). La linearità delle equazioni ci permette comunque di procedere secondo lo schema generale del cap. 4, ricercando innanzitutto in* **modi normali** *di vibrazione del campo.*

Applicando $\nabla\wedge$ *alla seconda equazione di Maxwell e* $\partial/\partial t$ *alla quarta ed utilizzando la prima e l'identità* $\nabla\wedge(\nabla\wedge\mathbf{V}) = \nabla\cdot(\nabla\cdot\mathbf{V}) - \triangle\mathbf{V}$*, si ottiene l'equazione*

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2} = \triangle\mathbf{E}$$

analoga a quella per corde e membrane (vedi cap. 4). Quindi si sviluppa $\mathbf{E}$ *sui modi normali* $\mathbf{u}_\alpha$ *(*α *è il solito indice generalizzato, non necessariamente discreto)*

$$\mathbf{E}(\mathbf{x},t) = \sum_\alpha E_\alpha(t)\mathbf{u}_\alpha(\mathbf{x})\,,$$

i quali soddisfano alle equazioni (si ricordi che l'operatore laplaciano è negativo semidefinito)

$$\triangle\mathbf{u}_\alpha = -k_\alpha^2\mathbf{u}_\alpha\,,\quad \nabla\cdot\mathbf{u}_\alpha = 0\,,$$

nonché alle condizioni al contorno, come ad esempio $\mathbf{n}\wedge\nabla\mathbf{u}_\alpha = 0$ *su ogni superficie conduttrice. Inoltre essi sono ortonormali*

$$\int d^3x\,\mathbf{u}_\alpha\cdot\mathbf{u}_{\alpha'} = \delta_{\alpha\alpha'}\,.$$

Si ottengono così le equazioni di oscillazione armonica

$$\ddot{E}_\alpha = -\omega_\alpha^2 E_\alpha \ ,$$

con frequenze $\omega_\alpha = ck_\alpha \geq 0$. *Il campo magnetico si ricava da quello elettrico, attraverso le relazioni*

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = -\sum_\alpha B_\alpha(t) \nabla \mathbf{u}_\alpha(\mathbf{x}) \ , \quad \dot{B}_\alpha = cE_\alpha \ . \tag{12.30}$$

PROBLEMA 12.3-10 []Si verifichi che il campo magnetico soddisfa alle appropriate condizioni al contorno su ogni superficie conduttrice. Inoltre, sfruttando il fatto che $\{\nabla \wedge \mathbf{u}_\alpha\}$ è ancora un insieme ortonormale di autofunzioni del Laplaciano, si verifichi che le ampiezze magnetiche B_α dei modi normali sono legate a quelle elettriche dalla relazione

$$\dot{E}_\alpha = -ck_\alpha^2 B_\alpha \tag{12.31}$$

per cui esse ubbidiscono alle stesse equazioni di oscillazione armonica di E_α.

Infine la Hamiltoniana del campo elettromagnetico assume la forma, sempre grazie alla ortonormalità delle funzioni $\mathbf{u}_\alpha$ *e* $\nabla \wedge \mathbf{u}_\alpha$,

$$H = \frac{1}{8\pi} \int d^3x \left(E^2 + B^2\right) = \frac{1}{8\pi} \sum_\alpha \left(E_\alpha^2 + k_\alpha^2 B_\alpha^2\right)$$

e, grazie alla seconda relazione in (12.30), *si può riscrivere come una collezione (infinita) di oscillatori armonici*

$$H = \tfrac{1}{2} \sum \left(P_\alpha^2 + \omega_\alpha^2 Q_\alpha^2\right) \ ,$$

a patto di identificare le ampiezze magnetiche con le "posizioni" e quelle elettriche con i "momenti" (o "velocità")

$$B_\alpha = 2c\sqrt{\pi} Q_\alpha \ , \quad E_\alpha = -\frac{1}{c}\dot{B}_\alpha = 2\sqrt{\pi}\dot{Q}_\alpha = 2\sqrt{\pi} P_\alpha \ . \tag{12.32}$$

Osservazione *[]Si noti che anche la corrispondenza opposta,* $E_\alpha \leftrightarrow Q_\alpha$ *e* $B_\alpha \leftrightarrow -P_\alpha$, *è perfettamente possibile, sfruttando la* (12.31). *In realtà le due procedure sono equivalenti,* in assenza di sorgenti esterne, *per via della* dualità elettrico-magnetica $\mathbf{E} \leftrightarrow -\mathbf{B}$ *delle equazioni di Maxwell nel vuoto, e finiscono per differire solo per uno sfasamento di* $\pi/2$ *delle oscillazioni armoniche. La scelta* (12.32) *appare attualmente più adeguata quando il campo e.m. viene accoppiato alla materia.*

A questo punto la quantizzazione del campo e.m. procede in modo canonico, promuovendo Q_α *e* P_α *ad operatori autoaggiunti che soddisfano le regole di* commutazione *canoniche. Dunque i quanti del campo e.m., cioè i* **fotoni**, *sono particelle bosoniche.*

La sostituzione usuale di ciascuna coppia Q, P *con la coppia* $a, a^\dagger$ *(vedi §6.2) porta alle espressioni finali per il campo e.m.*

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = -i \sum_\alpha (2\pi\hbar\omega_\alpha)^{1/2} \left[a_\alpha^\dagger(t) - a_\alpha(t)\right] \mathbf{u}_\alpha(\mathbf{x})$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = c \sum_\alpha \left(\frac{2\pi\hbar}{\omega_\alpha}\right)^{1/2} \left[a_\alpha^\dagger(t) + a_\alpha(t)\right] \nabla \wedge \mathbf{u}_\alpha(\mathbf{x})$$

Esse evidenziano che le osservabili locali $\mathbf{E}$ *e* $\mathbf{B}$ *sono operatori di campo autoaggiunti che creano e distruggono fotoni. La Hamiltoniana vale*

$$H = \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha \left(a_\alpha^\dagger a_\alpha + \tfrac{1}{2}\right)$$

e determina le equazioni del moto di Heisenberg

$$\dot{a}_\alpha(t) = \frac{i}{\hbar}[H, a_\alpha(t)] = -i\omega_\alpha a_\alpha(t)$$

che si integrano a $a_\alpha(t) = a_\alpha e^{-i\omega_\alpha t}$. *Possiamo quindi identificare lo stato fondamentale privo di fotoni, il* vuoto $|0\rangle$ *del campo e.m., in assenza di cariche e/o correnti, nello stato annichilato da tutti gli operatori di distruzione*

$$a_\alpha |0\rangle = 0 \,, \quad \forall n$$

e da qui ricostruire l'intero spazio di Fock dei fotoni come discusso al §12.3.3. Si noti che, come nel caso della corda quantistica, il vuoto elettromagnetico ha un'energia infinita. In ogni stato dello spazio di Fock il valor medio dell'energia è finito relativamente *allo stato fondamentale* $|0\rangle$. *In particolare gli stati con un numero definito* n_α *di fotoni in ciascun modo normale* $\mathbf{u}_\alpha(\mathbf{x})$ *sono autostati dell'energia con autovalore* $\sum_\alpha \hbar n_a \omega_\alpha$ *rispetto a* $|0\rangle$.

L'energia del vuoto, la cosiddetta **energia di punto zero** *dà luogo ad effetti osservabili, quali* l'effetto Casimir *(vedi ad esempio* [**IZ80**]*).*

12.3.7. Polarizzazione dei fotoni. *Consideriamo ora il caso delle onde elettromagnetiche, cioè delle soluzioni delle equazioni di Maxwell che descrivono la propagazione di energia sotto forma di radiazione elettromagnetica. Un modo pratico di procedere consiste nel rimuovere "all'infinito" le condizioni al contorno su* $\mathbf{E}$ *e* $\mathbf{B}$ *(alternativamente potremmo studiare geometrie adeguate come quelle delle guide d'onda, ma a prezzo di maggiori complicazioni).*

I modi normali del campo e.m. nello spazio vuoto ed infinito sono proporzionali alla parte reale ed alla parte immaginaria delle onde piane $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$, *cioè a seni e coseni. La decomposizione in modi normali coincide quindi con l'analisi di Fourier. Conviene fare come di consueto uso della notazione complessa, utilizzando gli esponenziali al posto delle*

funzioni trigonometriche, ma restringendo le ampiezze di Fourier con la condizione $\mathbf{E}_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \mathbf{E}_{-\mathbf{k}}$. *Poiché i modi normali*

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$$

devono soddisfare a $\nabla \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}} = 0$, *otteniamo la condizione di trasversalità* $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = 0$. *Per ogni valore di* $\mathbf{k}$ *vi sono perciò due possibili polarizzazioni indipendenti, che indicheremo con* $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k},\lambda}$, $\lambda = 1, 2$. *In definitiva l'indice generalizzato* α *viene identificato nella coppia* $(\mathbf{k}, \lambda)$ *e quindi gli operatori di creazione e distruzione si scrivono* $a_{\mathbf{k},\lambda}^{\dagger}$ *e* $a_{\mathbf{k},\lambda}$. *Essi creano e distruggono fotoni di numero d'onda* $\mathbf{k}$ *e polarizzazione definita* $\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda}$. *Dato che lo spazio di Hilbert in cui essi agiscono è complesso, per ogni* $\mathbf{k}$ *gli stati di polarizzazione sono in corrispondenza biunivoca con i raggi di* $\mathbb{C}^2$. *Ritroviamo così il risultato ricavato con argomenti semiclassici in §5.1.4.*

CAPITOLO 13

L'interazione elettromagnetica

13.1. L'accoppiamento minimale

L'interazione di una particella carica con il campo elettromagnetico è descritta in meccanica classica, come abbiamo visto nel §3.3, attraverso un termine aggiuntivo nella Lagrangiana Track 1

$$-e\,\phi(\mathbf{x},t) + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x},t)\cdot\boldsymbol{v}\,,$$

dove $(\mathbf{A},\phi)$ *costituiscono il potenziale (quadri-)vettore del campo elettromagnetico. Ciò comporta che l'Hamiltoniana classica è da modificare secondo la sostituzione (nota come "accoppiamento minimale")*

$$\begin{aligned}\mathbf{p} &\longrightarrow \boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\\ H(\mathbf{p},\mathbf{x}) &\longrightarrow H(\boldsymbol{\pi},\mathbf{x}) + e\phi(\mathbf{x})\end{aligned}$$

Le variabili $\boldsymbol{\pi}$ *vengono denominati* momenti cinematici *(mentre ai* $\mathbf{p}$ *rimane assegnato il termine di "momenti canonici"). Assumeremo che la stessa procedura si possa applicare in meccanica quantistica*[1]*. Su questo principio si basa tutta la teoria dell'interazione delle particelle elementari con il campo elettromagnetico. Vedremo nel seguito alcune applicazioni di quest'idea limitandoci per il momento al caso di campi elettromagnetici indipendenti dal tempo e considerati alla stregua di campi classici. La teoria completa, in cui il campo elettromagnetico assume il ruolo di campo dinamico quantistico, così come delineato alla fine del precedente capitolo, è nota come* **elettrodinamica quantistica** *e richiede tecniche di meccanica quantistica relativistica, che esulano dagli scopi di queste lezioni.*

PROBLEMA 13.1-1 [] Dimostrare che i momenti cinematici $\boldsymbol{\pi}$ formano la parte spaziale di un quadrivettore π_μ e che il commutatore $[\pi_\mu\,,\ \pi_\nu]$ è proporzionale a $F_{\mu\nu}$.

[1] Si ricordi che l'accoppiamento minimale emerge in modo naturale già da considerazioni di simmetria basate sulle trasformazioni galileiane (vedi il §9.3.10).

Come è noto dalla elettrodinamica classica, i campi di potenziale $(\mathbf{A}, \phi)$ *contengono informazioni sovrabbondanti. La fisica del campo elettromagnetico non cambia infatti se si assoggettano i potenziali ad una* trasformazione di gauge (3.8). *Lo stesso vale in meccanica quantistica, ossia le grandezze* osservabili *sono invarianti per trasformazioni di gauge. È tuttavia da osservare che nel formalismo si fa uso di numerosi oggetti non direttamente osservabili che non sono invarianti. In particolare la funzione d'onda non può essere invariante di gauge bensì è soggetta ad una trasformazione*

$$\psi(\mathbf{x}, t) \longrightarrow \exp\left\{ i \frac{e\chi(\mathbf{x}, t)}{\hbar c} \right\} \psi(\mathbf{x}, t)\,, \tag{13.1}$$

dove χ *è la stessa funzione che definisce la trasformazione sui potenziali. Questa scelta è dettata dal seguente risultato: se* $\psi(\mathbf{x}, t)$ *è soluzione dell'equazione di Schroedinger definita in termini dei potenziali* $\mathbf{A}$, ϕ, *la funzione trasformata secondo l'equazione* (13.1) *soddisfa l'equazione di Schroedinger in cui entrano i potenziali trasformati secondo l'equazione* (3.8). *Per dimostrare questo fatto è sufficiente inserire* $e^{ie\chi/\hbar c}\psi$ *in sostituzione di* ψ *nell'equazione*

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi\right)^2 \psi + e\left(\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\right)\psi\,.$$

La derivata del fattore di fase $e^{ie\chi/\hbar c}$ *cancella esattamente il termine addizionale al potenziale scalare, mentre il termine in* $\nabla\chi$ *è riassorbito dalla commutazione*

$$\nabla \exp\left\{ i \frac{e\chi(\mathbf{x})}{\hbar c} \right\} \psi = \exp\left\{ i \frac{e\chi(\mathbf{x})}{\hbar c} \right\} \left(\nabla + i \frac{e}{\hbar c} \nabla\chi \right) \psi$$

Dal momento che la trasformazione di gauge sulla funzione d'onda è data da una trasformazione unitaria, tutte le grandezze osservabili riconducibili a elementi di matrice di una qualche osservabile $\mathcal{O}$ *risultano invarianti, a patto di assoggettare le osservabili della teoria alla contemporanea trasformazione* $\mathcal{O} \longrightarrow \exp(ie\chi/\hbar c)\, \mathcal{O}\, \exp\{-ie\chi/\hbar c\}$ *equivalente alla prescrizione* $q \longrightarrow q$, $p \longrightarrow p - e/c\, \nabla\chi$.

Sebbene in meccanica quantistica sia mantenuto il principio secondo cui sono i campi $(\mathbf{E}, \mathbf{B})$ *a rappresentare i gradi di libertà fisici, nondimeno l'apparire dei potenziali* $(\mathbf{A}, \phi)$ *direttamente nelle equazioni dinamiche fondamentali comporta alcuni effetti peculiari, inaspettati dal punto di vista della fisica classica (si veda ad esempio il successivo §13.5).*

13.2. Campo magnetico costante

Track 1

Studiamo ora le proprietà dell'Hamiltoniano che descrive un elettrone soggetto ad un campo magnetico uniforme e costante. Nel seguito indichiamo

con e *il valore assoluto della carica elettronica. Possiamo scegliere il potenziale* $\mathbf{A}$ *come già fatto nella trattazione classica (si veda il Probl. 3.3-9 a p. 41)* $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \wedge \mathbf{x}$ *e otteniamo perciò (trascurando per il momento il contributo dello spin)*

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}\left[\left(p_1 - \frac{eB}{2c}y\right)^2 + \left(p_2 + \frac{eB}{2c}x\right)^2 + p_3^2\right] \\ &= \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + \frac{eB}{2mc}(xp_2 - yp_1) + \frac{m}{2}\left(\frac{eB}{2mc}\right)^2 (x^2 + y^2). \end{aligned}$$

avendo orientato l'asse z *nella direzione di* $\mathbf{B}$*. Si trova perciò che l'interazione con il campo magnetico è data dall'energia di un dipolo magnetico* $\boldsymbol{\mu}$ *legato al momento angolare orbitale* $\mathbf{L} = \mathbf{q} \wedge \mathbf{p}$ *dalla relazione*

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2mc}\mathbf{L}. \tag{13.2}$$

L'elettrone ha poi un momento magnetico intrinseco legato al suo momento angolare di spin*; di questo si tiene conto introducendo un termine addizionale all'Hamiltoniano* $\frac{1}{2}g\,(e/2mc)\,\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}$*, dove* g *è il* **rapporto giromagnetico** *dell'elettrone e vale* $g \approx 2$ *entro un errore di* 10^{-3}*. Si avrà dunque con questa approssimazione*

$$H = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + \frac{eB}{2mc}(L_z + \hbar\sigma_3) + \frac{m}{2}\left(\frac{eB}{2mc}\right)^2 (x^2 + y^2) + V(\mathbf{x}), \tag{13.3}$$

dove $V(\mathbf{x})$ *tiene conto di altre interazioni rappresentabili con un potenziale statico. Studieremo ora due casi particolari di questo Hamiltoniano; il primo è già contenuto nei primi lavori di Schroedinger (atomo di idrogeno in campo magnetico), il secondo fu studiato da Landau (*[**LL76**]*) ed è legato all'effetto Hall quantizzato (Von Klitzing 1980).*

13.3. Effetto Zeeman

Consideriamo l'Hamiltoniano che descrive l'atomo di idrogeno immerso in un campo magnetico uniforme e costante. Track 1

$$H = \frac{1}{2\mu}\left(\mathbf{p} + \frac{e}{2c}\mathbf{B} \wedge \mathbf{x}\right)^2 - \frac{e^2}{|\mathbf{x}|} + g\frac{e}{2\mu c}\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B} \tag{13.4}$$

Nel caso di campo magnetico debole possiamo valutare l'effetto sui livelli energetici per via approssimata applicando la teoria delle perturbazioni. Sviluppando il quadrato si ritrova

$$H = \frac{1}{2\mu}\mathbf{p}^2 - \frac{e^2}{|\mathbf{x}|} + \frac{e}{2\mu c}\mathbf{B}\cdot\left(\mathbf{x} \wedge \mathbf{p} + g\tfrac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}\right) + O(B^2) \tag{13.5}$$

che mostra come in prima approssimazione si possa trattare il problema come equivalente al contributo di energia per un dipolo magnetico[2]

$$\boldsymbol{\tau} = -\frac{e}{2\mu c}(\mathbf{L} + g\mathbf{s}) \tag{13.6}$$

essendo $\mathbf{L}$ *il momento angolare orbitale e* $\mathbf{s} = \hbar\boldsymbol{\sigma}/2$ *lo spin dell'elettrone. Dal momento che la perturbazione* $-\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}$ commuta con l'Hamiltoniana imperturbata, *se trascuriamo il termine quadratico nel campo, il calcolo dei nuovi livelli energetici è dato dalla formula perturbativa al primo ordine per livelli degeneri: dobbiamo semplicemente scegliere la base di autostati imperturbati in modo che la matrice che rappresenta la perturbazione sia diagonale. Ma le autofunzioni che abbiamo trovato nel §6.6 separando in coordinate polari l'equazione di Schroedinger sono già autofunzioni del momento angolare, con l'avvertenza di orientare l'asse* z *nella direzione del campo. Si ha perciò semplicemente*

$$E_{nlm_lm_s} = E_n^0 + \frac{eB}{2\mu c}\hbar(m_l + gm_s)\,. \tag{13.7}$$

dove m_l *e* m_s *sono i numeri quantici che individuano l'autovalore di* L_3 *e* σ_3 *rispettivamente, mentre* E_n^0 *è l'autovalore imperturbato dato dalla formula di Balmer. Questa impostazione del problema non tiene conto tuttavia di un elemento molto importante che in realtà risulta dominante per campi deboli: il momento magnetico dell'elettrone in moto rispetto al campo elettrico del nucleo vede un campo magnetico locale che si può stimare in*

$$\mathbf{B}_{\text{loc}} \approx \frac{1}{c}\mathbf{E} \wedge \boldsymbol{v}\,, \tag{13.8}$$

e che contribuisce all'energia un termine denominato **accoppiamento spin-orbita***:*

$$\delta H = -\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}_{\text{loc}} \tag{13.9}$$

(il coefficiente $1/2$ *è dovuto ad un effetto di cinematica relativistica noto come* precessione di Thomas *– si veda la discussione dettagliata in* [**CS60**]*). Inserendo* $\mathbf{E} = -\frac{\mathbf{x}}{r}\frac{dV(r)}{dr}$ *valida per un campo centrale, si trova così il contributo addizionale all'Hamiltoniano*

$$V_{so} = \frac{g}{2}\frac{e}{2\mu^2 c}\left(\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right)\mathbf{s}\cdot\mathbf{L}, \tag{13.10}$$

[2]Ricordiamo che il termine di momento di dipolo magnetico orbitale deve essere corretto per un fattore $1-O(\mu/M)$ che tiene conto del rinculo del nucleo (vedi Probl. 3.4-14).

che nel caso dell'idrogeno diventa (per $g = 2$*)*

$$V_{so} = \frac{1}{2}\left(\frac{e}{\mu c}\right)^2 \frac{\mathbf{s}\cdot\mathbf{L}}{r^3}\,. \tag{13.11}$$

Si noti che introducendo unità atomiche (r *misurato in unità del raggio di Bohr* a*, energie riferite all'unità* e^2/a *e momento angolare in unità* $\hbar$*) si può scrivere semplicemente* $V_{so} = \frac{1}{2}\alpha^2\mathbf{s}\cdot\mathbf{L}/r^3$*, dove* $\alpha = e^2/\hbar c$ *è la costante di struttura fine. A quest'ordine di approssimazione bisogna anche tenere conto delle correzioni relativistiche. Se scriviamo l'energia cinetica nella forma già considerata (Probl. 5.2-4) la correzione all'ordine* c^{-2} *è data da* $-\frac{1}{8}\,\mathbf{p}^4/m^3c^2$ *che pure risulta di ordine* α^2*.*

PROBLEMA 13.3-2 []Determinare la correzione al primo ordine perturbativo dei livelli energetici dell'atomo di idrogeno dovuta all'accoppiamento spin-orbita e alla correzione relativistica.

SOLUZIONE *[]Si tratta di applicare la teoria delle perturbazioni dei livelli degeneri. Si deve perciò diagonalizzare la matrice della perturbazione*

$$H' = H'_{rel} + V_{so} = -\frac{\mathbf{p}^4}{8\mu^3c^2} + \frac{1}{2}\left(\frac{e\hbar}{\mu c}\right)^2 \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{l}}{2r^3}$$

dove $\mathbf{l} = \mathbf{L}/\hbar$*. La base più conveniente è suggerita dal fatto che* $\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{l}$ *è esprimibile in termini di* $(\mathbf{l} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma})^2$*. Conviene introdurre cioè la base in cui è diagonale il momento angolare totale* $\left|j, m, l, \frac{1}{2}\right\rangle$ *secondo la tecnica della somma dei momenti angolari (vedi il §8.3). Si avrà infatti*

$$\langle j, m, l|\,\mathbf{l}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,|j, m, l\rangle = j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}$$

che è da valutare per $j = l \pm \frac{1}{2}$ *e precisamente*

$$\langle \mathbf{l}\cdot\boldsymbol{\sigma}\rangle = \begin{cases} l & \textit{per } j = l + \frac{1}{2} \\ -l-1 & \textit{per } j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \tag{13.12}$$

Inoltre la matrice del fattore r^{-3} *risulta già diagonale per via dell'invarianza rotazionale ed è espressa da integrali che abbiamo considerato nel Probl. 6.6-35:*

$$\left\langle n\, l \pm \tfrac{1}{2}\, M\, l\right| \frac{1}{r^3} \left|n\, l \pm \tfrac{1}{2}\, M\, l\right\rangle = \frac{1}{l(l+1)(l+\frac{1}{2})\, n^3\, a^3}\,. \tag{13.13}$$

Per valutare il contributo del termine proporzionale a $\mathbf{p}^4$*, conviene riesprimere quest'ultimo come segue*

$$\mathbf{p}^4 = (2\mu)^2\left(H_0 + e^2/r\right)^2,$$

di modo che $\langle n|\,\mathbf{p}^4\,|n\rangle$ *risulta calcolabile in termini di elementi di matrice già noti. Si trova così*

$$\langle n|\,H'_{rel}\,|n\rangle = E^0_n\,\frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right)$$

Combinando i vari contributi si ottiene finalmente la formula

$$E_{nj} = E_n^0 \left(1 + \frac{\alpha^2}{n^2}(n/(j+\tfrac{1}{2}) - 3/4)\right); \tag{13.14}$$

si noti che il contributo del termine di spin costituisce una parte considerevole della correzione. La correzione all'ordine α^2 dipende solo dal momento angolare totale j*; in particolare sono ancora degeneri a questo ordine di approssimazione i livelli con* $j = \frac{1}{2}$ *costruiti con gli stati* $l = 0$ *e* $l = 1$ *e con* $n = 2$ *(nella notazione spettroscopica, gli stati* $2s_{1/2}$ *e* $2p_{1/2}$*). La discrepanza con l'esperimento, che prevede invece una differenza di energia tra i due stati, è nota come* **Lamb shift** *e trova una spiegazione in elettrodinamica quantistica* [**Sch64, IZ80, Kin90, Wei95**].

13.4. Livelli di Landau

Track 1

Se nell'Hamiltoniano (13.3) *scegliamo* $V = V(z)$ *in modo che l'elettrone sia confinato nella direzione* z *ad una regione essenzialmente piana bidimensionale otteniamo come caso particolare l'Hamiltoniano efficace*

$$H = \frac{1}{2m}\left[\left(p_1 - \frac{eB}{2mc}y\right)^2 + \left(p_2 + \frac{eB}{2mc}x\right)^2\right] + \frac{eB}{2mc}\sigma_3\,. \tag{13.15}$$

In un caso realistico l'elettrone sarà anche confinato in una regione spaziale $-L_1/2 < x < L_1/2$, $-L_2/2 < y < L_2/2$ *o altro dominio fissato dalla geometria del dispositivo a semiconduttore. Per il momento tuttavia studiamo il caso ideale in cui l'elettrone si muove nell'intero piano* xy*. Il problema ammette perciò invarianza per traslazioni, per quanto questa sia mascherata dalla introduzione del potenziale vettore* $\mathbf{A}$*. Sappiamo già dallo studio del corrispondente sistema classico che la simmetria di traslazione è effettivamente realizzata e che i generatori delle trasformazioni infinitesimali* (3.9) *tengono conto anche della necessaria trasformazione di gauge. In meccanica quantistica, come si verifica facilmente, i corrispondenti operatori*

$$\begin{gathered} \mathfrak{P}_1 = p_1 + \frac{eB}{2c}y, \quad \mathfrak{P}_2 = p_2 - \frac{eB}{2c}x \\ [\mathfrak{P}_1, \mathfrak{P}_2] = i\hbar\frac{eB}{c} \end{gathered} \tag{13.16}$$

commutano con l'Hamiltoniano e si possono perciò utilizzare per semplificare lo studio dello spettro. Nel problema entrano due coppie di operatori con relazioni di commutazioni canoniche; oltre a $\mathfrak{P}_i$ *abbiamo gli operatori che entrano direttamente nella definizione dell'Hamiltoniano (i cosiddetti* momenti cinematici *o* derivate covarianti*)* π_1, π_2 *che differiscono dai*

precedenti per un segno:

$$\pi_1 = p_1 - \frac{eB}{2c}y\,, \quad \pi_2 = p_2 + \frac{eB}{2c}x$$
$$[\pi_1, \pi_2] = -i\hbar\frac{eB}{c}.$$

Possiamo perciò definire due distinti operatori di distruzione, $\mathcal{A} = \mathcal{N}(\pi_1 - i\pi_2)$ *e* $\mathfrak{A} = \mathcal{N}(\mathfrak{P}_1 + \mathfrak{P}_2)$*, dove* $\mathcal{N}$ *è scelta in modo da ottenere le regole di commutazione bosoniche* $[\mathcal{A}, \mathcal{A}^\dagger] = [\mathfrak{A}, \mathfrak{A}^\dagger] = 1$*. In termini di questi l'Hamiltoniano è dato da*

$$H = \frac{\hbar eB}{2mc}(\mathcal{A}^\dagger\mathcal{A} + \mathcal{A}\mathcal{A}^\dagger + \sigma_3)\,,$$

che mostra immediatamente che lo spettro di energia è costituito da livelli equispaziati della quantità $\hbar\Omega = \hbar eB/mc$*, in accordo con il fatto che le orbite classiche sono periodiche con frequenza* Ω *(la* **frequenza di Larmor***). In conseguenza del fatto che l'Hamiltoniano commuta con gli operatori* $\mathfrak{A}$ *e* $\mathfrak{A}^\dagger$*, si ha che ogni livello di energia è* infinitamente degenere*. Infatti ogni sottospazio corrispondente ad un livello energetico risulta invariante rispetto all'applicazione degli operatori* $\mathfrak{A}$ *e* $\mathfrak{A}^\dagger$*, e dal fatto che questi ultimi sono operatori canonici segue che il sottospazio non può avere dimensione finita (si ricordi il teorema di Wintner). Più concretamente, detto* $|0\rangle$ *lo stato fondamentale definito da*

$$\mathcal{A}\,|0\rangle = 0\,, \quad \mathfrak{A}\,|0\rangle = 0\,, \quad \sigma_3\,|0\rangle = -\,|0\rangle\,,$$

si può costruire una base di autovettori di H *applicando gli operatori di creazione*

$$|nm, s = -1\rangle = \frac{\mathcal{A}^{\dagger n}\mathfrak{A}^{\dagger m}}{\sqrt{n!m!}}\,|0\rangle\,,$$

ed altrettanti stati si ottengono a partire dalla soluzione con spin $s = +1$*. Si noti che l'energia dipende solo dalla combinazione* $n + s$ *e dunque si ha degenerazione infinita. Questa particolarità del problema della particella carica in campo magnetico costante di presentare livelli infinitamente degeneri è stata scoperta da Landau già nel 1930, e perciò si parla di* **livelli di Landau***. Tenendo conto delle dimensioni finite della regione in cui si può realizzare un campo magnetico uniforme (le dimensioni del dispositivo a semiconduttore) la simmetria di traslazione è rotta dalle condizioni al contorno e quindi la degenerazione infinita non è realizzabile in pratica. Un argomento semiclassico mostra che ogni livello di Landau è in realtà costituito da un numero finito di stati indipendenti, proporzionali all'area* L_1L_2 *disponibile all'elettrone. Si ha infatti che gli operatori* $\mathfrak{Q}_i = 2c\mathfrak{P}_i/eB$ *si possono interpretare come le coordinate del centro delle orbite circolari che costituiscono le soluzioni delle equazioni classiche del moto (vedi il*

§3.3.1). Ma dalla regola di commutazione $[\mathfrak{Q}_1, \mathfrak{Q}_2] = -i\hbar c/eB$ *segue che possiamo considerare l'area* $L_1 L_2$ *alla stregua di una porzione di spazio delle fasi e il numero di stati indipendenti è valutabile come il numero di celle elementari di area* hc/eB *(che rappresenta la "costante di Planck effettiva" del problema). Si avrà dunque più realisticamente una degenerazione di ordine*

$$N \approx \frac{eB}{hc} L_1 L_2 \,. \tag{13.17}$$

PROBLEMA 13.4-3 []Dimostrare che il primo livello di Landau corrisponde alle autofunzioni della forma

$$\psi(x, y) = f(x - iy)\ \exp\left\{-\frac{eB}{4\hbar c}(x^2 + y^2)\right\} \chi_{s=-1}$$

dove f è una funzione analitica della variabile complessa $\zeta = x - iy$.

SOLUZIONE *[]Il primo livello di Landau è definito da* $\mathcal{A}\psi = 0$. *Dalla definizione di* $\mathcal{A}$ *segue*

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - \frac{eB}{2c}y + \hbar\frac{\partial}{\partial y} - i\frac{eB}{2c}x\right)\psi(x, y) = 0 \tag{13.18}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi(x, y) = \frac{eB}{2c}(x - iy)\psi(x, y) \tag{13.19}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right)\log\psi(x, y) = \frac{eB}{2\hbar c}(x - iy). \tag{13.20}$$

Introducendo la variabile complessa $\zeta = x - iy$ *l'ultima equazione diventa*

$$\frac{\partial}{\partial\bar{\zeta}}\log\psi = \frac{eB}{2\hbar c}\zeta$$

da cui segue

$$\log\psi = \frac{eB}{4\hbar c}|\zeta|^2 + C\,,$$

con $\partial C/\partial\bar{\zeta} = 0$, *da cui segue il risultato, ponendo* $f = e^C$.

PROBLEMA 13.4-4 []Determinare la forma generale delle autofunzioni appartenenti all'n-esimo livello di Landau.

PROBLEMA 13.4-5 []Analizzare il problema dei livelli di Landau nella gauge $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$.

Track 2

13.4.1. L'effetto Hall quantizzato. *Una delle scoperte più notevoli in anni recenti è costituita dall'effetto Hall quantizzato. Immaginiamo di confinare un gas di elettroni ad una regione piana di forma rettangolare. Ciò può realizzarsi ad una giunzione Ga-As applicando una tensione* V_g *in direzione ortogonale alla giunzione. L'elettrone è soggetto al campo elettrico uniforme e ad una barriera repulsiva. Se il campo è sufficientemente alto, la funzione d'onda sarà "congelata" in direzione trasversale all'autofunzione dello stato fondamentale mentre rimangono liberi i soli gradi*

di libertà longitudinali alla giunzione. Se si applica un campo magnetico trasversale B *a questo sistema effettivamente bidimensionale, ci troviamo nella situazione descritta in precedenza in termini di livelli di Landau. La dimensione finita del dispositivo rende approssimata la descrizione in termini di livelli infinitamente degeneri; ogni livello di Landau sarà risolto in un* cluster *di livelli, ma se il campo magnetico è sufficientemente intenso potremo considerare questi livelli come degeneri, con molteplicità data dalla stima semiclassica* (13.17) *e precisamente* eB/hc *per unità di superficie. Immaginiamo che il primo livello di Landau sia interamente occupato da elettroni. La densità di carica superficiale è perciò* $\rho = e^2 B/hc$. *Se si applica un campo elettrico* E *longitudinale si crea una corrente Hall* i_H *ortogonale al campo elettrico; questa si può determinare osservando che elettroni in moto con velocità* v *sono in condizioni di muoversi come particelle libere se la forza di Lorentz equilibra la forza elettrostatica, ossia* $E = vB/c$. *La densità lineare di corrente Hall è dunque*

$$j_H = \rho v = \frac{e^2 B}{hc} \cdot \frac{Ec}{B} = \frac{e^2}{h} E\,, \tag{13.21}$$

che corrisponde ad una conducibilità trasversale $\sigma_{xy} = e^2/h$. *Se si realizza la situazione in cui* N *livelli di Landau sono completamente popolati la conducibilità risulta moltiplicata per* N. *L'aspetto più notevole del risultato è costituito dal fatto che la conducibilità Hall risulta indipendente dalla temperatura e dalle caratteristiche del materiale ed è invece espressa dalla combinazione di costanti fondamentali* e^2/h. *Una circostanza che ha reso possibile la scoperta di questo notevolissimo effetto è costituita dal fatto che la presenza di impurezze rende più stabile il fenomeno per cui il valore preciso della conducibilità multipla di* e^2/h *si mantiene con grande precisione (*10^{-8} *di errore relativo) per un intero intervallo di valori del campo elettrico che confina gli elettroni nel film sottile alla giunzione. Si osservano infatti delle curve di conducibilità simili alla Fig. 13-1. Per approfondire l'argomento, tuttora argomento di ricerca attiva, si vedano* [**Kli86, Aok87, PG90, CP88, Fer94**] *e gli ultimi numeri della "Physical Review".*

13.5. L'effetto Aharonov-Bohm

Track 2

Come abbiamo già sottolineato, sebbene l'interazione elettromagnetica sia mediata dal potenziale elettromagnetico, la fisica che si deduce dall'equazione di Schroedinger è invariante per trasformazioni di gauge. Le osservabili fisiche sono cioè indipendenti dalla scelta particolare del potenziale A_μ *che corrisponde ad un dato campo* $F_{\mu\nu}$. *Ci si può tuttavia chiedere se i campi* $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ *che costituiscono i campi osservabili dell'elettrodinamica esauriscano le osservabili fisiche. La risposta, sulla base di una*

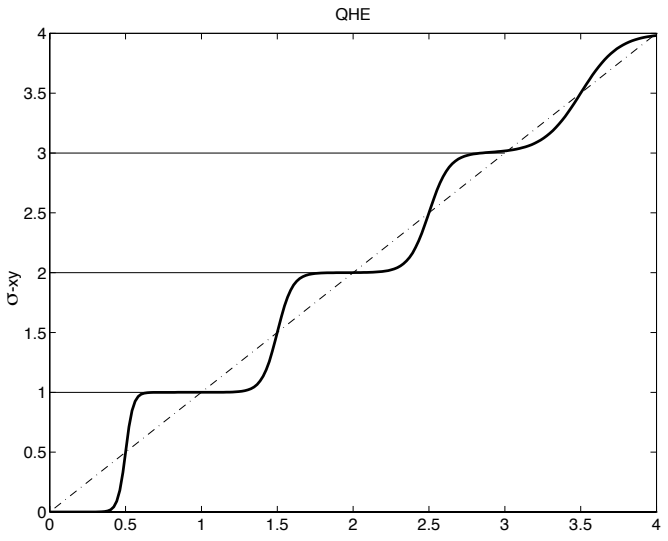


FIGURA 13-1. *La conducibilità Hall* σ_{xy} *in unità* e^2/h. *In ascissa la tensione* V_g.

ricca serie di esperimenti, sembra essere negativa. L'aspetto fondamentale che distingue la dinamica quantistica da quella classica è il carattere non-locale della funzione d'onda; ciò comporta che mentre nella dinamica classica il moto della particella dipende soltanto dai campi nell'intorno della particella, e quindi soltanto da $(\mathbf{E}, \mathbf{B})$ *nel punto in cui è localizzata la particella, la funzione d'onda quantistica è invece sensibile anche a proprietà globali del campo in tutto lo spazio. In un certo senso, la funzione d'onda* sente *anche la topologia dello spazio*[3]*. Consideriamo la seguente situazione: un campo magnetico* $\mathbf{B}$ *è presente in una regione cilindrica* $\mathcal{C}_< = \{x^2 + y^2 < R^2, (z \text{ qualunque})\}$ *, e in questa regione è diretto lungo l'asse del cilindro ed ha modulo costante. Il cilindro è tenuto ad un potenziale elettrostatico fortemente negativo in modo che un elettrone non possa penetrare al suo interno. In questa situazione la fisica classica prevede che l'elettrone non senta l'influenza del campo magnetico. Secondo l'equazione di Schroedinger invece il campo magnetico influenza la*

[3]Dal punto di vista matematico una proprietà che differenzia un campo irrotazionale (a rotore nullo) da uno conservativo consiste nella possibilità di avere un integrale di circuitazione $\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} \neq 0$ nel caso in cui il campo di definizione di $\mathbf{A}$ sia molteplicemente connesso. L'esempio tipico cui siamo familiari dall'elettromagnetismo è dato dal campo magnetico generato da una corrente $\mathbf{j}$; il campo soddisfa $\nabla \wedge \mathbf{B} = 0$, ma la circuitazione lungo un cammino che abbraccia la corrente è data dalla legge di Ampère.

dinamica dell'elettrone attraverso il potenziale $\mathbf{A}$ *che* risulta diverso da zero anche all'esterno del cilindro. *All'esterno di* $\mathcal{C}$ *non possiamo porre* $\mathbf{A} = 0$*; possiamo sì scegliere il gauge in modo che il potenziale si annulli in qualche sottoinsieme di* $\mathcal{C}_> \equiv \mathbb{R}^3 - C_<$ *ma non dappertutto: infatti si deve avere, per il teorema di Stokes,* $\oint \mathbf{A} \cdot dx = \Phi$ *, dove* Φ *è il flusso del campo magnetico concatenato al cammino di integrazione. Ci si deve chiedere a questo punto: la presenza di un potenziale* $\mathbf{A}$ *irrotazionale nell'equazione di Schroedinger può produrre effetti misurabili? Questo è quanto si sono chiesti Y. Aharonov e D. Bohm* [**AB59**] *secondo cui un effetto misurabile si ha proprio nell'esperimento delle due fenditure. Un pennello elettronico viene fatto incidere su uno schermo con due fenditure a distanza* d *e si osservano le ordinarie frange di diffrazione se la lunghezza d'onda di De Broglie è dello stesso ordine di grandezza di* d*. Immaginiamo che dietro lo schermo, situato in mezzo alle due fenditure, sia collocato un solenoide che generi un campo magnetico. L'elettrone che arriva sullo schermo non riesce a penetrare nel solenoide, opportunamente schermato, e quindi non risente della forza di Lorentz. Tuttavia quello che si osserva è che le frange di diffrazione subiscono uno spostamento* dipendente dal flusso del campo magnetico *(si veda ad es.* [**K⁺84, T⁺82**]*). Lo spostamento si trova anzi essere* periodico *nella sua dipendenza dall'intensità del campo. L'equazione di Schroedinger con accoppiamento minimale al campo magnetico rende conto perfettamente di questo fatto (e anzi l'effetto è stato predetto teoricamente prima di essere verificato sperimentalmente). Una spiegazione immediatamente intuitiva (vedi* [**MMP77**]*) si ha anticipando un risultato che illustreremo nell'App. A.1. Il propagatore* $\langle x| \exp\{-iHt\} |x'\rangle$ *è dato in approssimazione semi-classica da* $\exp\{iS/\hbar\}$*, dove* S *è l'azione* $\int L\, dt$ *lungo la traiettoria classica che congiunge* x *a* x'*. L'azione contiene, nel caso di accoppiamento magnetico, un termine aggiuntivo* $e/c \int \mathbf{A} \cdot dx$*. Se consideriamo due traiettorie che passano attraverso le due fenditure, la differenza nell'azione classica è data principalmente dall'integrale di circuitazione* $e/c \oint \mathbf{A} \cdot dx \equiv \Phi$*, e quindi le due traiettorie contribuiscono al propagatore con uno sfasamento pari a* $\exp\{ie\Phi/\hbar c\}$*; le frange di diffrazione non sono più simmetriche rispetto alle fenditure in quanto alla differenza di cammino geometrico contribuisce allo sfasamento il flusso magnetico, con conseguente rottura di simmetria. La formula precedente rende conto del fatto che l'effetto è periodico nel valore del flusso:* $\Phi + hc/e$ *produce lo stesso effetto di* Φ*.*

L'osservazione dell'effetto Aharonov-Bohm evidenzia un problema insito della procedura di quantizzazione; se noi partiamo dal sistema classico definito nell'esterno del cilindro, nulla vieta di descrivere il moto classico con l'Hamiltoniana libera $\mathbf{p}^2/2m$*. La quantizzazione con il metodo impiegato finora* $\mathbf{p} \to -i\hbar\nabla$ *ci darebbe allora l'equazione di Schroedinger libera*

e nessun effetto AB. Il punto cruciale che risolve questa apparente inconsistenza è costituito dalla non-unicità della rappresentazione dell'algebra di Heisenberg*: è falso cioè che si possa applicare allo spazio di Hilbert* $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3 - \mathcal{C})$ *il teorema di Von Neumann. Esistono in realtà rappresentazioni inequivalenti dell'algebra degli operatori canonici e l'insieme delle rappresentazioni irriducibili è parametrizzato da un numero reale che può identificarsi con il flusso di* $\mathbf{B}$ *all'interno del cilindro. Le rappresentazioni inequivalenti sono individuate dalla diversa definizione dell'operatore* p_φ *che corrisponde alla componente del momento angolare nella direzione dell'asse del cilindro. Si ha in ogni caso* $p_\varphi \psi = -i\hbar \partial\psi/\partial\varphi$ *, ma il dominio di definizione per* p_φ *è dato da*

$$\psi(2\pi) = e^{i\alpha}\psi(0) \ .$$

Si dimostra che identificando $\alpha = e\Phi/\hbar c$ *si ottiene un Hamiltoniano unitariamente equivalente a quello definito in termini di un accoppiamento con il campo* $\mathbf{A}$*.*

È interessante osservare che si è messo in evidenza anche un effetto AB scalare*, cioè dovuto alla parte scalare del potenziale. Ciò è realizzato suddividendo in due un fascio di elettroni e facendo transitare i due fasci in zone a potenziale elettrostatico differente. L'equazione di Schroedinger prevede allora una differenza di fase* $\exp\{i\Delta V t/\hbar\}$*. In questa forma l'esperimento è realizzabile anche sfruttando il campo gravitazionale. Esperimenti di interefenza con fasci neutronici hanno confermato con grande precisione le previsioni dell'equazione di Schroedinger (si vedano* [**Sak90, Gre86**]*).*

PROBLEMA 13.5-6 []Un fascio di neutroni di lunghezza d'onda λ viene suddiviso in due parti e poi ricomposto in modo coerente. I due fasci percorrono un tratto lungo L a due quote differenti z_1, z_2. Dimostrare che la differenza di fase tra i due fasci è approssimativamente $\Delta\Phi = m^2 g \hbar^{-2} \lambda |z_2 - z_1|$.

Parte 3

Appendici

APPENDICE A

Complementi

Non esprimerti mai
in forma più chiara
dei tuoi pensieri.
Niels Bohr.

A.1. La meccanica quantistica secondo Feynman

Nello sviluppo della meccanica quantistica abbiamo seguito inizialmente il punto di vista ondulatorio, basato sull'equazione di Schroedinger, e ne abbiamo visto poi l'inquadramento nella formulazione più generale ispirata alle idee del gruppo di Gottinga e Cambridge (Born, Heisenberg, Jordan e Dirac). Esiste un'altra formulazione equivalente, legata al nome di Richard P. Feynman, che si è dimostrata molto efficace nello studio di sistemi a infiniti gradi di libertà. Ci dobbiamo limitare per ovvi motivi di spazio ad una trattazione molto succinta, affidando il lettore ai numerosi trattati disponibili sull'argomento [**FH65, Sch81, Roe91, Sim79**].

A.1.1. Integrali sui cammini. L'idea di Feynman consiste nel caratterizzare in modo del tutto sintetico il propagatore $G(x, x', 0, t)$ (definito nel §5.3) direttamente in termini della funzione di azione $S[x(t)]$ definita dalla meccanica classica: al propagatore quantistico $G(x, x', 0, t)$ contribuiscono tutte le possibili traiettorie virtuali del sistema meccanico classico, cioè tutti i cammini $x(t)$ compatibili con gli eventuali vincoli e tali che $x(0) = x'$, $x(t) = x$, con un'ampiezza

$$\exp\{iS[x]/\hbar\} = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t L(x(\tau), \dot{x}(\tau))\, d\tau\right\} .$$

La somma su tutti i cammini costituisce una sorta di integrale su uno spazio a infinite dimensioni e si indica simbolicamente con

$$G(x, x', 0, t) = \langle x| e^{-iHt/\hbar} |x'\rangle = \int \mathcal{D}x(.)\, \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t L(x, \dot{x})\, d\tau\right\}\Bigg|_{\substack{x(0)=x' \\ x(t)=x}} .$$

Questa formula si propone quindi come un'alternativa alla regola di quantizzazione canonica, in quanto permette di definire il propagatore a partire dalla Lagrangiana classica. Si noti l'eleganza di questa idea che rende molto intuitivo il legame tra meccanica classica e quantistica: ogni cammino

virtuale contribuisce all'ampiezza totale con un'ampiezza di modulo uno e dunque nessun cammino particolare è più probabile degli altri. Tuttavia nel limite in cui la costante $\hbar$ sia piccola rispetto alle azioni in gioco nel sistema fisico, il principio della fase stazionaria ci dice che i contributi di tutti i cammini si cancellano per interferenza tranne quelli per cui la fase $S[x]$ risulti stazionaria rispetto a piccole variazioni del cammino, il che costituisce il principio di Eulero–Lagrange che determina le equazioni del moto classiche. Ecco dunque svelato il fondamento di tutti i principi variazionali della meccanica classica: si tratta semplicemente di manifestazioni del principio della fase stazionaria applicata alla formulazione quantistica in termini di somma sui cammini! Resta "soltanto" aperto il problema di dare un significato matematico preciso all'integrazione sui cammini e di verificare che in tal modo si ottiene effettivamente la meccanica quantistica.

In effetti il concetto di integrazione sui cammini o integrazione funzionale (estensione a infinite dimensioni del calcolo integrale) può essere formulato in termini matematicamente rigorosi, ma in un contesto differente, quello dei processi diffusivi, che corrisponde all'equazione di Schroedinger in cui si prenda la continuazione analitica a valori immaginari del tempo. Si tratta di uno sviluppo molto interessante che ha portato alla applicazione dell'integrale sui cammini al calcolo dello spettro per teorie di campo quantistiche al di fuori del regime perturbativo. Il nocciolo della questione è costituito dal fatto che la continuazione analitica a tempi immaginari permette di studiare le proprietà dell'operatore $\exp\{-tH/\hbar\}$ da cui in particolare si ottengono informazioni sullo spettro e su elementi di matrice di varie osservabili (si veda [**Roe91, Sim79, ID89**]).

Una prima giustificazione intuitiva della formula di Feynman discende da una proprietà che possiamo definire *di semigruppo*: suddividiamo l'insieme $\mathcal{C}$ di tutti i cammini $\omega : x' \to x$ nei sottoinsiemi $\mathcal{C}_{x''}$ definiti dalla condizione aggiuntiva $x(t'') = x''$ per un qualche t'' scelto arbitrariamente nell'intervallo $(0, t)$. Si avrà ovviamente

$$\begin{aligned} G &= \int dx'' \int \mathcal{D}x(.) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t L\, d\tau\right\} \delta(x(t'') - x'')\Big|_{\substack{x(0)=x'\\ x(t)=x}} \\ &= \int dx'' \int \mathcal{D}x(.) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t''}^t L\, d\tau\right\}\Big|_{\substack{x(t'')=x''\\ x(t)=x}} \times \\ &\quad \times \int \mathcal{D}x(.) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^{t''} L\, d\tau\right\}\Big|_{\substack{x(0)=x'\\ x(t'')=x''}}. \end{aligned}$$

Gli integrali sui cammini soddisfano perciò ad una legge di composizione identica a quella tipica di un propagatore (si veda la (5.64)). D'altra parte questo fatto ci permette di procedere nella suddivisione dell'intervallo

$(0,t)$ applicando ricorsivamente questa legge di composizione, in modo tale che per una suddivisione sufficientemente fine dell'intervallo potremo applicare un'approssimazione dell'integrale sui cammini valida per tempi brevi. Sia $(t_1, t_2, \ldots, t_N)$ una suddivisione con N molto grande. Per ogni sotto-intervallo (t_k, t_{k+1}) consideriamo la soluzione $x_{cl}(\tau)$ delle equazioni classiche del moto tale che $x_{cl}(t_k) = x_k$, $x_{cl}(t_{k+1}) = x_{k+1}$. Poniamo in ciascun intervallo $x(\tau) = x_{cl}(\tau) + \xi(\tau)$, dove ξ è una nuova variabile di integrazione funzionale soggetta al vincolo $\xi(t_k) = \xi(t_{k+1}) = 0$. Inserendo nell'azione otteniamo

$$S[x] = \int_{t_k}^{t_{k+1}} \left(\tfrac{1}{2} m(\dot{x}_{cl}^2 + 2\dot{\xi}\dot{x}_{cl} + \dot{\xi}^2) \right.$$
$$\left. -V(x_{cl}) - V'(x_{cl})\xi - \tfrac{1}{2}V''(x_{cl})\xi^2 + O(\xi^3) \right) d\tau \Big|_{\substack{\xi(t_k)=0 \\ \xi(t_{k+1})=0}} .$$

I termini lineari in ξ si cancellano grazie alle equazioni del moto e si trova allora per la somma sui cammini nell'intervallo considerato

$$\int \mathcal{D}\xi \exp\left\{\frac{i}{\hbar} L(x_{cl} + \xi)\right\} = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}]\right\} \times$$
$$\int \mathcal{D}\xi \, \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \left(\tfrac{m}{2}\dot{\xi}^2 - \tfrac{1}{2}V''(x_{cl}(\tau))\xi(\tau)^2 + O(\xi^3)\right) d\tau\right\} .$$

La dipendenza dalle coordinate x_k è contenuta esplicitamente nel termine dell'azione classica e implicitamente nell'integrale funzionale su ξ; dal momento che ξ è vincolata ad annullarsi agli estremi dell'intervallo (t_k, t_{k+1}) possiamo assumere che (come per il moto browniano vincolato o *brownian bridge*) si abbia $\int d\xi \, \xi(\tau)^2 = O((t_k - t_{k+1})^2)$ e quindi che l'unica dipendenza dalle coordinate provenga dal termine di azione classica[1]. Se ammettiamo dunque che l'integrale sui cammini per tempi brevi sia dominato dalla porzione di traiettoria classica che connette i due punti estremi dell'intervallo infinitesimo otteniamo

$$G(x, x', 0, t) \approx \int\cdots\int dx_1 \, dx_2 \ldots dx_N \, \exp\left\{\sum_{n=1}^{N+1} \frac{i}{\hbar} S(x_{n-1}, x_n, t_{n-1}, t_n)\right\}$$

(A.1)

$$= \int\cdots\int dx_1 \, dx_2 \ldots dx_N \, \exp\left\{\sum_{n=0}^{N} \frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{t_{n+1} - t_n} - V(x_n)(t_{n+1} - t_n)\right)\right\}$$

con le condizioni $x_0 = x', x_{N+1} = x, t_0 = 0, t_{N+1} = t$. Si noti che questa espressione del propagatore in termini di integrali multipli è presente nelle lezioni di Dirac ([**Dir59**], § 32), a cui si può far risalire la prima idea

[1] Di passaggio notiamo che per l'oscillatore armonico il termine V'' è una costante e perciò l'integrale sui cammini risulta in una semplice funzione del tempo mentre il propagatore si riduce alla formula semiclassica $G = \exp\{iS/\hbar\}$, come si può verificare dalla formula (6.16).

di integrali sui cammini. Si ha così un primo suggerimento riguardo al modo di interpretare la somma su tutti i cammini: introdotta una griglia di tempi $(t_1, t_2, \ldots, t_N)$ si considerano le posizioni $x(t_j), (j = 1, N)$ come variabili indipendenti su cui integrare; la somma sui cammini si definisce come il limite per $N \to \infty$ di questo integrale N-dimensionale.

Una derivazione della formula (A.1.1) si può ottenere dall'equazione di Schroedinger secondo la linea mostrata da Nelson [**Nel64**]. Sia $H = T + V$ la decomposizione dell'Hamiltoniano in energia cinetica e potenziale. Si utilizza allora la formula di Lie-Trotter che permette di esprimere l'operatore di evoluzione temporale $U(t) = \exp\{-it(T+V)/\hbar\}$ come limite di un prodotto di operatori facilmente calcolabili:

$$U(t) = \lim_{N\to\infty} \left(\exp\{-itT/N\hbar\} \exp\{-itV/N\hbar\}\right)^N .$$

Si inseriscono tanti relazioni di completezza $\int dx\, |x\rangle \langle x| = \mathbb{1}$ in modo da ottenere

$$\begin{aligned}\langle x| U(t) |x'\rangle = \lim_{N\to\infty} \langle x| e^{-itT/N\hbar} \int dx_1\, |x_1\rangle \langle x_1| e^{-itV/N\hbar} e^{-itT/N\hbar} \\ \int dx_2\, |x_2\rangle \langle x_2| \ldots \int dx_{N-1}\, |x_{N-1}\rangle \langle x_{N-1}| \\ e^{-itT/N\hbar} \int dx_N\, |x_N\rangle \langle x_N| e^{-itV/N\hbar} |x'\rangle .\end{aligned}$$

Dal momento che V è funzione solo di q si ha semplicemente

$$\exp\{-itV(q)/N\hbar\} |x_k\rangle = \exp\{-itV(x_k)/N\hbar\} |x_k\rangle ,$$

mentre gli altri elementi di matrice sono dati dal propagatore della particella libera (Probl. 5.3-13 a p. 109) e quindi

$$\begin{aligned}\langle x| U(t) |x'\rangle = \lim_{N\to\infty} \int\cdots\int dx_1 \ldots dx_{N-1} \\ \prod_{k=1}^{N-1} \sqrt{\frac{mN}{2\pi i\hbar t}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(\tfrac{mN}{2t}(x_{k+1} - x_k)^2 - \tfrac{t}{N} V(x_k)\right)\right\} .\end{aligned}$$

Si nota che l'esponente costituisce giustamente un'approssimazione discreta per l'integrale che definisce l'azione classica. In più questa derivazione i) ci dà una prova della convergenza per il limite $N \to \infty$ (teorema di Kato-Trotter, si veda [**Nel64**]) e ii) ci fornisce anche la normalizzazione corretta (il fattore divergente $(2\pi i\hbar t/Nm)^{-N/2}$).

Un'interessante variante di questa formula discretizzata permette di impostare l'integrale sui cammini in termini Hamiltoniani. Per ciascun fattore che coinvolge l'energia cinetica, anziché inserire la formula nota,

riscriviamo tutto facendo uso della trasformata di Fourier

$$\langle x_k| \exp\left\{-i\frac{t}{N}\,T(p)/\hbar\right\}|x_{k+1}\rangle =$$
$$(2\pi\hbar)^{-1}\int dp_k\,\exp\left\{i\,p_k(x_{k+1}-x_k)/\hbar - i\frac{t}{N}\,T(p_k)/\hbar\right\}.$$

Il nuovo termine si riconosce immediatamente come un'approssimazione discreta dell'integrale $\int d\tau\, p(\tau)\dot{x}(\tau)$, e perciò l'integrale sui cammini assume il seguente aspetto

$$\langle x|\,U(t)\,|x'\rangle = \lim_{N\to\infty}\iint \frac{dx_1\,dp_1}{2\pi\hbar}\cdots$$
$$\iint \frac{dx_N\,dp_N}{2\pi\hbar}\,\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_k\left(p_k(x_{k+1}-x_k)-H(p_k,x_k)\right)\right\}\delta(x_N-x')\,,$$

ovvero simbolicamente

$$\langle x|\,U(t)\,|x'\rangle = \int \frac{\mathcal{D}q(.)\,\mathcal{D}p(.)}{2\pi\hbar}\,\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t\left(p(\tau)\dot{q}(\tau)-H(q(\tau),p(\tau))\right)d\tau\right\}.$$

Questa formulazione, apparentemente più complicata per via del doppio numero di integrazioni coinvolte, può al contrario in taluni casi risultare più conveniente. Se si introduce un regolatore del tipo

$$\exp\left\{-\nu^{-1}\int_0^t d\tau(\dot{p}^2+\mu^2\dot{x}^2)\right\}$$

l'integrale è ben definito e porta (nel limite $\nu\to\infty$) ad una formulazione alternativa della quantizzazione che dà risultati essenzialmente equivalenti alla meccanica basata sull'equazione di Shroedinger, ma getta nuova luce sulla permanenza in meccanica quantistica delle simmetrie dell'Hamiltoniano classico (vedi il Probl. A.1-5). Inoltre l'integrale sui cammini Hamiltoniano può essere utilizzato come metodo di integrazione numerica dell'equazione di Schroedinger dipendente dal tempo [**OMT91**].

Tutte le formule precedenti sono scritte per semplicità di notazione per un solo grado di libertà, ma la generalizzazione a un numero qualunque di variabili canoniche non presenta difficoltà.

A.1.2. Formulazione a tempo immaginario. Per illustrare un'applicazione dell'integrale sui cammini, vale la pena sottolineare che il propagatore contiene tutte le informazioni necessarie per caratterizzare il sistema quantistico. In particolare per estrarre lo spettro di energia possiamo semplicemente integrare il propagatore con una qualunque funzione di prova $\psi(x)$ ad ottenere

$$\int dx\int dx'\,\overline{\psi(x)}\,G(x,x,0,t)\,\psi(x') = \sum_n |\langle E_n|\psi\rangle|^2\,e^{-iE_n t/\hbar}\,,$$

che può fornire gli autovalori E_n attraverso l'analisi di Fourier. In alternativa si è trovato conveniente studiare il propagatore *a tempi immaginari* $G(x, x', \beta) = \langle x| \exp\{-\beta H\} |x'\rangle$, che rappresenta anche la **matrice densità**. La rappresentazione in termini di integrali sui cammini (vedi [**Fey72**]) è del tutto simile a quanto visto per il propagatore ordinario, con una differenza fonamentale: la Lagrangiana del sistema è sostituita dall'energia $E(q, \dot{q})$:

$$\langle x| \exp(-\beta H) |x'\rangle = \int \mathcal{D}q \, \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_0^\beta \left(\frac{m}{2}\dot{x}^2 + V(x)\right) d\tau\right\}\Bigg|_{\substack{x(0)=x' \\ x(\beta)=x}}.$$

Mostriamo ora come sia possibile esprimere alcune caratteristiche spettrali dell'Hamiltoniano direttamente in termini di integrali sui cammini a tempo immaginario. Consideriamo l'elemento di matrice

$$\Phi(\tau) \equiv \langle E_0| q \exp\{-\tau H\} \, q \, \exp\{\tau H\} |E_0\rangle \, ,$$

dove $|E_0\rangle$ è lo stato fondamentale di H, con autovalore E_0, e τ è positivo. Inserendo la relazione di completezza $\mathbb{1} = \sum_E |E\rangle\langle E|$, si trova

$$\Phi(\tau) = \sum_E e^{-(E-E_0)\tau} |\langle 0| q |E\rangle|^2 .$$

D'altra parte si ha anche per un qualunque vettore ψ (soggetto all'unica condizione di non essere ortogonale allo stato fondamentale)

$$|E_0\rangle = \lim_{T\to\infty} \mathcal{N}(T) \, e^{-TH} |\psi\rangle$$

con $\mathcal{N}(T) = \exp\{-TE_0\} \langle E_0|\psi\rangle$. Si trova perciò, inserendo la rappresentazione di Feynman

$$\begin{aligned} \Phi(\tau) &= \lim_{T\to\infty} \frac{\langle\psi| e^{-TH} q \, e^{-\tau H} \, q \, e^{-TH} |\psi\rangle}{\langle\psi| e^{-(2T+\tau)H} |\psi\rangle} \\ &= \frac{\int \mathcal{D}q \; q(0) \, q(\tau) \, \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{m}{2}\dot{q}^2 + V(q)\right) dt\right\}}{\int \mathcal{D}q \, \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{m}{2}\dot{q}^2 + V(q)\right) dt\right\}} . \end{aligned} \tag{A.2}$$

La funzione $\Phi(\tau)$, che contiene informazioni dinamiche interessanti, è riconducibile perciò ad un integrale sui cammini che si presenta come una *funzione di correlazione* tra variabili di tipo statistico. La rappresentazione discreta dell'integrale (A.2) è infatti identica all'espressione che daremmo alla correlazione tra le due variabili classiche $q(0)$, $q(\tau)$ che rappresentano lo scostamento dall'equilibrio di una corda elastica di lunghezza infinita soggetta ad una forza di potenziale $V(q)$ e **in equilibrio termico alla temperatura** $kT \equiv \hbar$. Dato che risulta relativamente agevole simulare con il calcolo numerico sistemi classici soggetti ad agitazione

termica, questo fatto apre la possibilità di ottenere informazioni riguardanti lo spettro del sistema quantistico attraverso una simulazione numerica. L'idea risale alla fine degli anni '40 ed è legata al nome di Marc Kac; la formula di integrazione sui cammini a tempo immaginario è nota come formula di Feynman-Kac [**Sim79**].

A.1.3. La meccanica stocastica. Nella formulazione a tempo immaginario l'integrazione sui cammini è del tutto equivalente dal punto di vista matematico alla teoria che descrive il *moto browniano*. Dobbiamo limitarci ad indicare le parole chiave **processi stocastici**, **processi diffusivi**, **equazione di Langevin** e rimandare ai testi specialistici sull'argomento [**Kac59, PR69, Roe91**]. Vale tuttavia la pena di tenere presente il quadro schematico seguente.

Sia $\boldsymbol{w}(t)$ il moto browniano standard: con questo si intende il processo stocastico caratterizzato dalla proprietà che gli incrementi $d\boldsymbol{w}(t)$ sono variabili aleatorie gaussiane indipendenti con media zero e

$$< [w_i(t_1) - w_i(t_2)] \left[w_j(t_1') - w_j(t_2')\right] >= \delta_{ij}\, \mu[(t_1, t_2) \bigcap (t_1', t_2')]$$

(indichiamo con $\mu[I]$ la misura dell'intervallo I e con $I_1 \bigcap I_2$ l'intersezione dei due intervalli). Sia $\boldsymbol{x}(t)$ un processo diffusivo legato al moto browniano dall'equazione differenziale stocastica

$$d\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x})\, dt + \sigma(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{w}(t)\,,$$

essendo le funzioni $\boldsymbol{b}$ e σ soggette a condizioni non molto restrittive [**PR69**]. Allora la densità di probabilità del processo soddisfa l'equazione di evoluzione (Fokker-Planck)

$$\frac{\partial P(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t} = \tfrac{1}{2} \triangle \left(\sigma(\boldsymbol{x})^2\, P(\boldsymbol{x}, t)\right) - \operatorname{div}\left(\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x})\, P(\boldsymbol{x}, t)\right)\,.$$

Inoltre se il "campo di trascinamento" $\boldsymbol{b}$ ha la forma particolare

$$\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) = \tfrac{1}{2}\sigma(\boldsymbol{x})^2 \nabla S(\boldsymbol{x})\,,$$

il processo tende per grandi tempi di evoluzione alla distribuzione stazionaria

$$P_\infty(\boldsymbol{x}) = \frac{2}{\sigma(\boldsymbol{x})^2} \exp\{-S(\boldsymbol{x})\}\,.$$

Su queste formule si basa la possibilità di valutare i valori medi $\langle q(0) q(t)\rangle$ attraverso la soluzione numerica di equazioni di tipo classico con un termine di rumore gaussiano, simili per natura alle equazioni che descrivono la dinamica delle particelle browniane.

PROBLEMA A.1-1 []Determinare la distribuzione di probabilità a tempi molto grandi per un processo diffusivo che soddisfa l'equazione

$$dx(t) = -\omega x(t) + dw(t)\,.$$

SOLUZIONE *[]L'equazione è lineare e si integra facilmente. Il risultato è dato da un integrale che rappresenta un funzionale lineare del moto browniano, e quindi un processo gaussiano. La distribuzione di probabilità a tempi grandi è una gaussiana di ampiezza proporzionale a* ω^{-1} *(si veda* [**Wax54**] *per il processo di Ornstein-Uhlenbeck).*

PROBLEMA A.1-2 []Determinare la distribuzione di probabilità a tempi molto grandi per un processo diffusivo che soddisfa l'equazione

$$dx(t) = (1 + |x|^2)\,dw(t)\ .$$

PROBLEMA A.1-3 []L'integrale sui cammini per una particella carica immersa in un campo magnetico $\mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}$ è ottenuto inserendo la Lagrangiana classica (3.7)

$$G(x, x', t) = \int \mathcal{D}x(.)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t d\tau\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x) + \frac{e}{c}\mathbf{A}(x)\cdot\dot{x}\right)\right\}\ .$$

Ricavare l'integrale sui cammini che rappresenta il propagatore a tempo immaginario.

PROBLEMA A.1-4 []Si consideri l'integrale sui cammini

$$\Pi(q, p, q', p') = \int\limits_{\substack{q(0)=q',\,p(0)=p'\\ q(T)=q\ ,\,p(T)=p}} \mathcal{D}q(.)\,\mathcal{D}p(.)\,\exp\left\{i\int_0^T p(t)dq(t)\right\}\ .$$

Dimostrare che, almeno formalmente, Π è indipendente da T e rappresenta il nucleo integrale di un proiettore, ossia

$$\int dq''\,dp''\,\Pi(q, p, q'', p'')\,\Pi(q'', p'', q', p') = \Pi(q, p, q', p')$$

PROBLEMA A.1-5 [] Si modifichi l'integrale sui cammini del problema precedente inserendo un termine gaussiano

$$\Pi_\nu(q, p, q', p') =$$
$$\int\limits_{\substack{q(0)=q',\,p(0)=p'\\ q(T)=q\ ,\,p(T)=p}} \mathcal{D}q(.)\,\mathcal{D}p(.)\,\exp\left\{i\int_0^T p(t)dq(t) - \tfrac{1}{2}\nu^{-1}\int_0^T (\dot{p}(t)^2 + \dot{q}(t)^2)\,dt\right\}\ .$$

Dimostrare che la funzione Π_ν definita nel problema precedente rappresenta il nucleo integrale dell'operatore $\exp\{-TK\}$, dove

$$K = \tfrac{1}{2}\nu\left[\left(-i\frac{\partial}{\partial p} - q\right)^2 + \left(-i\frac{\partial}{\partial q}\right)^2\right],$$

coincide formalmente con l'Hamiltoniano che descrive la dinamica di una particella carica in due dimensioni immersa in un campo magnetico uniforme e costante ortogonale al piano (come discusso al §13.4).

SOLUZIONE *[]Si applichi la formula che descrive l'integrale di Feynman per tempo immaginario. Si noti che nel limite* $\nu \to \infty$ *si trova che il proiettore* Π *del problema precedente viene identificato con il proiettore sul sottospazio che corrisponde* al primo livello di Landau. *Per i dettagli si veda* [**Kla88, KO89**].

A.2. Teorie di gauge in meccanica quantistica

Questa Appendice è stata scritta da **Paolo Maraner**.

Le *teorie di gauge* costituiscono un soggetto relativamente nuovo nel panorama della fisica teorica, ma, a dispetto di questo, occupano già un posto di grande rilievo e costituiscono attualmente il fondamento generale della descrizione delle interazioni fondamentali tra particelle elementari. L'origine dell'idea di una simmetria *locale* si può fare risalire a Weyl[2] nel contesto di un tentativo di unificazione tra elettromagnetismo e gravitazione. Nella forma più generale, che coinvolge una simmetria *locale non-abeliana*, è stata enunciata nel 1954 da C. N. Yang e R. L. Mills [**YM54**]. Queste teorie sono rimaste prive di applicazione fino alla fine degli anni Sessanta, quando si sono rivelate uno strumento indispensabile nella descrizione delle interazioni fondamentali. A questi primi grandi successi è seguita un'intensa attività di ricerca che ha messo in luce l'importanza di questo tipo di strutture in molti campi della fisica teorica. Da un punto di vista formale le teorie di gauge costituiscono una generalizzazione della descrizione dell'interazione di una particella carica con il campo elettromagnetico, trattata nei §3.3, §9.4, e nel cap. 13. Mentre rimandiamo ai testi di teoria quantistica dei campi per una trattazione generale delle teorie di gauge (vedi [**ID89, IZ80, Wei95**]), mostreremo nel seguito come la struttura matematica costituita da campi di gauge non-abeliani si presenti in modo naturale anche nella dinamica quantistica non-relativistica di sistemi semplici (per altri esempi si vedano [**Ber84, WZ84, SW89**]).

A.2.1. Approssimazione adiabatica e campi di gauge. Nel §10.4 si è considerata la dinamica di sistemi caratterizzati da uno o più parametri adiabatici λ che determinano le proprietà dei sistemi stessi o dei campi in cui questi si trovano immersi. Negli esempi che abbiamo considerato i parametri adiabatici erano rappresentati da grandezze fisiche classiche ed il loro valore poteva venire variato a nostro piacere agendo sul sistema dall'esterno. D'altro canto ad un livello più profondo i parametri λ dovranno essere considerati anch'essi come variabili dinamiche. In questo paragrafo riprendiamo l'analisi dell'approssimazione adiabatica in meccanica quantistica considerando sistemi in cui un certo numero di gradi di libertà presenta una dinamica estremamente più lenta dei rimanenti, dimodoché

[2] Si veda ad esempio [**Pau58**], §65.

i primi possono essere considerati come *parametri adiabatici* nello studio dell'evoluzione dei secondi[3]. La soluzione del problema dinamico può allora essere affrontata considerando dapprima il moto dei gradi di libertà *veloci* in corrispondenza ad ogni configurazione assegnata delle variabili *lente* ed analizzando infine il moto efficace di queste. Un fatto di grande interesse è che l'interazione tra gradi di libertà veloci e lenti si manifesta nella dinamica efficace di questi ultimi mediante l'interazione con campi di gauge.

Per fissare le idee ed avere come costante punto di riferimento un caso di rilevanza fisica consideriamo la descrizione di una molecola costituita da un certo numero di nuclei, che supporremo per semplicità tutti di massa $M = Zm_n$ ed un numero arbitrario di elettroni di massa m_e. La grande differenza tra le masse dei nuclei e quella dell'elettrone ($m_n \simeq 1800 m_e$) fa sì che il moto dei primi risulti estremamente più lento di quello dei secondi, dimodoché le frequenze e quindi le energie corrispondenti al moto nucleare risultano estremamente più piccole di quelle relative al moto elettronico. Il calcolo dello spettro del sistema può allora essere affrontato considerando dapprima il moto degli elettroni in corrispondenza ad ogni configurazione nucleare assegnata ed analizzando infine la dinamica nucleare efficace relativa ad un determinato stato elettronico. Nel seguito svilupperemo la nostra analisi con costante riferimento alla stima di uno spettro molecolare, riferendoci ai gradi di libertà *lenti* e *veloci* del sistema come a quelli nucleari ed elettronici rispettivamente. I risultati che otterremo sono comunque di validità generale e possono essere utilizzati nello studio di qualunque sistema adiabatico.

Indicheremo con $\mathbf{X}^I$ e $\mathbf{P}_I = -i\hbar\,\partial/\partial\mathbf{X}^I$, $I = 1, 2, \dots$, gli operatori posizione e momento relativi ai gradi di libertà lenti, i nuclei, e con $\mathbf{x}^i$ e $\mathbf{p}_i = -i\hbar\,\partial/\partial\mathbf{x}^i$, $i = 1, 2, \dots$, quelli relativi ai gradi di libertà veloci, gli elettroni. Le coordinate nucleari $\mathbf{X}^I$ giuocheranno evidentemente il ruolo dei paramentri adiabatici che "guidano" la dinamica elettronica.

Lo spettro del sistema, nuclei più elettroni, deve essere calcolato risolvendo l'equazione di Schroedinger agli stati stazionari

$$H\psi^E(\mathbf{X}, \mathbf{x}) = E\psi^E(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \tag{A.1}$$

relativa all'Hamiltoniano a molti corpi

$$H = \frac{1}{2M}\sum_I \mathbf{P}_I^2 + \frac{1}{2m}\sum_i \mathbf{p}_i^2 + V(\mathbf{X}, \mathbf{x}). \tag{A.2}$$

[3] L'idea risale addirittura al 1927 [**BO27**] e costituisce l'approssimazione di **Born-Oppenheimer** ripresa in tempi recenti da vari autori [**Ber84, WZ84**].

Nel calcolo di uno spettro molecolare l'energia potenziale $V(\mathbf{X},\mathbf{x})$ è una complicata funzione di $\mathbf{X}$ ed $\mathbf{x}$ data dalla somma delle energie di interazione coulombiane nucleo-nucleo, elettrone-elettrone e nucleo-elettrone ed, eventualmente, di altre osservabili quali lo spin. La sua forma esplicita non giuoca tuttavia nessun ruolo particolare nella nostra discussione.

Procediamo separando l'Hamiltoniano in una parte *lenta* ed una parte *veloce* come

$$H = \frac{1}{2M}\sum_I \mathbf{P}_I^2 + h(\mathbf{X}), \tag{A.3}$$

$$h(\mathbf{X}) = \frac{1}{2m}\sum_i \mathbf{p}_i^2 + V(\mathbf{X},\mathbf{x}). \tag{A.4}$$

Nel regime adiabatico $h(\mathbf{X})$ descrive la dinamica delle variabili veloci in dipendenza dai valori assunti dal parametro $\mathbf{X}$. In corrispondenza ad ogni suo autostato, l'Eq. (A.3) può allora essere assimilata all'Hamiltoniano che descrive la dinamica efficace dei gradi di libertà lenti. In generale tuttavia H ed $h(\mathbf{X})$ non commutano, $[H, h(\mathbf{X})] \neq 0$, e non è possibile pertanto diagonalizzare simultaneamente i due operatori. Visto d'altro canto che $h(\mathbf{X})$ commuta con l'operatore posizione nello spazio delle variabili lente $\mathbf{X}$, $[\mathbf{X}, h(\mathbf{X})] = 0$, possiamo pensare di separare la dinamica elettronica da quella nucleare scegliendo una base dello spazio degli stati dell'intero sistema in cui $\mathbf{X}$ ed $h(\mathbf{X})$ risultino simultanemente diagonali.

Supponiamo di saper risolvere il problema agli autovalori relativo all'Hamiltoniano $h(\mathbf{X})$ in corrispondenza ad ogni valore del parametro $\mathbf{X}$

$$h(\mathbf{X})\phi_n(\mathbf{X},\mathbf{x}) = \epsilon_n(\mathbf{X})\phi_n(\mathbf{X},\mathbf{x}), \tag{A.5}$$

dove tanto gli autovalori $\epsilon_n(\mathbf{X})$ quanto gli autovettori $\phi_n(\mathbf{X},\mathbf{x})$ dell'Hamiltoniano veloce $h(\mathbf{X})$ dipendono parametricamente da $\mathbf{X}$. Per ogni valore fissato del parametro l'insieme degli autostati $\phi_n(\mathbf{X},\mathbf{x})$, $n = 0, 1, \ldots$, costituisce una base dello spazio degli stati delle variabili veloci. In tutta generalità possiamo allora espandere la dipendenza da $\mathbf{x}$ delle autofunzioni $\psi^E(\mathbf{X},\mathbf{x})$ dell'Hamiltoniano totale (A.2) sulla base delle $\phi_n(\mathbf{X},\mathbf{x})$

$$\psi^E(\mathbf{X},\mathbf{x}) = \sum_n \psi_n^E(\mathbf{X})\phi_n(\mathbf{X},\mathbf{x}). \tag{A.6}$$

I coefficienti dello sviluppo $\psi_n^E(\mathbf{X})$ dipenderanno ovviamente dal valore di $\mathbf{X}$ e possono essere interpretati come le funzioni d'onda che descrivono lo stato delle variabili nucleari quando il sistema si trova nello stato elettronico $\epsilon_n(\mathbf{X})$. Scelta questa decomposizione per le funzioni d'onda $\psi^E(\mathbf{X},\mathbf{x})$

l'Eq. (A.1) si riscrive come

$$\sum_n \left(\frac{1}{2M} \sum_I \mathbf{P}_I^2 \phi_n(\mathbf{X}, \mathbf{x}) + \epsilon_n(\mathbf{X}) \phi_n(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \right) \psi_n^E(\mathbf{X}) = \sum_n E \phi_n(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \psi_n^E(\mathbf{X}),$$

e la dipendenza dalle variabili elettroniche può essere rimossa moltiplicando a sinistra per $\overline{\phi_m(\mathbf{X}, \mathbf{x})}$ ed integrando su tutto lo spazio delle $\mathbf{x}$

$$\sum_n \left(\frac{1}{2M} \sum_I \int \overline{\phi}_m \mathbf{P}_I^2 \phi_n \, d\mathbf{x} + \delta_{mn} \epsilon_n(\mathbf{X}) \right) \psi_n^E(\mathbf{X}) = E \psi_m^E(\mathbf{X}). \tag{A.7}$$

L'Eq. (A.1) si riduce allora ad un'equazione agli autovalori per un operatore matriciale che agisce sulle funzioni d'onda[4]

$$\Psi^E(\mathbf{X}) = (\psi_0^E(\mathbf{X}), \psi_1^E(\mathbf{X}), \ldots)^T ,$$

definite per ogni valore di $\mathbf{X}$ le matrici $\mathcal{A}_I(\mathbf{X})$ come

$$\mathcal{A}_I^{mn}(\mathbf{X}) = i\hbar \int \overline{\phi_m(\mathbf{X}, \mathbf{x})} \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}^I} \phi_n(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \tag{A.8}$$

il primo termine del membro di sinistra della Eq. (A.7) può essere riscritto

$$\int \overline{\phi}_m \mathbf{P}_I^2 \phi_n \, d\mathbf{x} = \sum_l (\delta_{ml} \mathbf{P}_I - \mathcal{A}_I^{ml})(\delta_{ln} \mathbf{P}_I - \mathcal{A}_I^{ln}),$$

dimodoché, introdotti i *momenti cinematici*

$$\mathbf{\Pi}_{Imn} = \delta_{mn} \mathbf{P}_I - \mathcal{A}_I^{mn}$$

l'equazione di Schroedinger (A.1) per l'intero sistema, nuclei più elettroni, può essere riscritta come

$$\sum_n H_{mn} \psi_n^E(\mathbf{X}) = E \psi_n^E(\mathbf{X}), \tag{A.9}$$

dove l'Hamiltoniano H_{mn} è l'operatore matriciale

$$H_{mn} = \frac{1}{2M} \sum_I \sum_l \mathbf{\Pi}_{I,ml} \mathbf{\Pi}_{I,ln} + \delta_{mn} \epsilon_m(\mathbf{X}). \tag{A.10}$$

Da un punto di vista formale la (A.9) appare come l'equazione di Schroedinger per un sistema descritto dalla funzione d'onda $\Psi^E(\mathbf{X})$ in interazione con un campo di gauge non abeliano descritto dal potenziale vettore $\mathcal{A}_I^{mn}(\mathbf{X}) = i\hbar \int \overline{\phi_m} \, \partial_I \phi_n \, d\mathbf{x}$ e con il potenziale scalare rappresentato dalla

[4] Siamo passati, in definitiva, dalla *rappresentazione delle coordinate* dello spazio delle variabili elettroniche ad una sorta di *rappresentazione delle energie*, sostituendo alla variabile $\mathbf{x}$ il numero quantico n.

matrice $V(\mathbf{X}) = \delta_{mn}\epsilon_m(\mathbf{X})$ (non si somma sulla m). Supponiamo infatti di effettuare una trasformazione di gauge locale sullo stato $\Psi^E(\mathbf{X})$

$$\psi^E_m(\mathbf{X}) \to \psi^{E\,\prime}_m(\mathbf{X}) = \sum_n U_{mn}(\mathbf{X})\,\psi^E_n(\mathbf{X}), \tag{A.11}$$

dove in ogni punto $\mathbf{X}$, $U_{mn}(\mathbf{X})$ rappresenta una matrice unitaria. Visto che la funzione d'onda totale del sistema deve rimanere inalterata rispetto a questa trasformazione, dalla (A.6) ricaviamo immediatamente che le autofunzioni elettroniche devono trasformarsi come segue

$$\phi_m(\mathbf{X},\mathbf{x}) \to \phi'_m(\mathbf{X},\mathbf{x}) = \sum_n \phi_n(\mathbf{X},\mathbf{x})U_{nm}(\mathbf{X})\,.$$

La (A.11) corrisponde pertanto ad un cambiamento di base dipendente dal valore del paramentro $\mathbf{X}$ nello spazio degli stati elettronici. Dalla definizione (A.8) ricaviamo immediatamente la legge di trasformazione per $\mathcal{A}^{mn}_I$

$$\mathcal{A}^{mn}_I \to \mathcal{A}^{mn\,\prime}_I = U_{mp}\mathcal{A}^{pq}_I U^\dagger_{qn} + i\hbar\, U_{mp}\,\partial_I U^\dagger_{pn} \tag{A.12}$$

Il campo vettoriale a valori matriciali $\mathcal{A}^{mn}_I(\mathbf{X})$ rappresenta il potenziale vettore associato ad un campo di gauge non abeliano e la trasformazione (A.12) costituisce la generalizzazione della trasformazione di gauge. Si noti che la matrice unitaria U è l'analogo del fattore di fase $\exp\{ie\chi(x,t)/\hbar c\}$ che entra nella trasformazione della funzione d'onda (13.1).

Osservazione *[]Individuato il potenziale vettore si può costruire il campo $F_{\mu\nu}$ in analogia con il caso abeliano come commutatore dei momenti cinematici (ricordiamo il Probl. 13.1-1):*

$$\mathcal{F}_{ij} \propto [\Pi_i\,,\,\Pi_j] = -i\hbar\left(\partial_i\mathcal{A}_j - \partial_j\mathcal{A}_i + i/\hbar\,[A_i\,,\,A_j]\right)\,. \tag{A.13}$$

Si noti che le matrici $\mathcal{F}_{ij}$ si trasformano in modo covariante sotto una trasformazione di gauge

$$\mathcal{F}_{ij} \to \mathcal{F}'_{ij} = U(x)\,\mathcal{F}_{ij}\,U^\dagger(x)\,,$$

il che comporta che si possono costruire oggetti invarianti di gauge prendendo la traccia di qualunque polinomio nel campo $\mathcal{F}$, in particolare $\sum_{ij}\mathrm{Tr}\,\mathcal{F}^2_{ij}$ che rappresenta la tipica densità di azione per un campo di gauge non-abeliano.

È bene sottolineare che fino a questo punto non è stata fatta alcuna approssimazione e la (A.9) è completamente equivalente alla (A.1). La dipendenza dalle variabili elettroniche è stata rimossa risolvendo la famiglia di equazioni di Schroedinger (A.5) in corrispondenza ad ogni configurazione dei parametri $\mathbf{X}$ e la dinamica delle variabili nucleari è descritta in modo esatto dall'equazione (A.9).

Approssimazione adiabatica. Torniamo ora all'interpretazione fisica del nostro modello per capire se e quando è possibile procedere ad una soluzione approssimata dell'equazione (A.9). Se accettiamo l'interpretazione delle $\psi_n^E(\mathbf{X})$ come quella di funzioni d'onda che descrivono lo stato delle variabili nucleari quando i gradi di libertà elettronici si trovano in una configurazione con energia $\epsilon_n(\mathbf{X})$, una rapida analisi dell'Hamiltoniano (A.10) indica che gli stati nucleari corrispondenti ad energie elettroniche distinte sono accoppiati unicamente dagli elementi di matrice $\mathcal{A}_I^{mn}(\mathbf{X})$ con $\epsilon_m(\mathbf{X}) \neq \epsilon_n(\mathbf{X})$.

In virtù dell'enorme differenza tra energie corrispondenti al moto elettronico ed a quello nucleare risulta d'altro canto estremamente improbabile che l'eccitazione o la diseccitazione di un grado di libertà nucleare provochi una transizione tra stati elettronici distinti. Supporremo pertanto il sistema in uno stato elettronico fissato, trascurando le transizioni tra stati differenti. Nel regime adiabatico è lecito trascurare gli elementi di matrice dell'Hamiltoniano che accoppiano stati elettronici con energia differente, il che equivale a considerare

$$\mathcal{A}_I^{mn}(\mathbf{X}) \simeq 0 \text{ per } \epsilon_m(\mathbf{X}) \neq \epsilon_n(\mathbf{X}). \tag{A.14}$$

In questo regime la (A.9) si separa in un sistema di equazioni agli autovalori che descrivono ciascuna la dinamica nucleare efficace in corrispondenza ai vari stati elettronici.

Caso non degenere. Consideriamo anzitutto il caso in cui il sistema si trovi in uno stato elettronico non degenere $\epsilon_n(\mathbf{X})$. Sia $\phi_n(\mathbf{X}, \mathbf{x})$ l'autostato elettronico corrispondente e $\psi_n^E(\mathbf{X})$ la funzione d'onda che descrive lo stato nucleare. La (A.9) si riduce allora all'equazione di Schroedinger scalare

$$\left\{ \frac{1}{2M} \sum_I (\mathbf{P}_I - A_I(\mathbf{X}))^2 + \epsilon_n(\mathbf{X}) \right\} \psi_n^E(\mathbf{X}) = E\, \psi_n^E(\mathbf{X}) \tag{A.15}$$

dove $\epsilon_n(\mathbf{X})$ appare come un termine di potenziale ed il potenziale vettore $A_I(\mathbf{X})$ deve essere calcolato come

$$A_I(\mathbf{X}) = i\hbar \int \overline{\phi_n(\mathbf{X}, \mathbf{x})} \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}^I} \phi_n(\mathbf{X}, \mathbf{x})\, d\mathbf{x}. \tag{A.16}$$

La dinamica efficace dei gradi di libertà nucleari in corrispondenza ad uno stato elettronico non degenere risulta pertanto descritta da un Hamiltoniano scalare in interazione minimale con il campo di gauge $U(1)$ rappresentato dal potenziale vettore $A_I(\mathbf{X})$ e con il potenziale $\epsilon_n(\mathbf{X})$

È importante sottolineare che il potenziale vettore $A_I(\mathbf{X})$ non descrive un campo magnetico reale, bensì un campo formalmente equivalente ad

un campo magnetico prodotto nel regime adiabatico dall'interazione tra variabili elettroniche e variabili nucleari.

Caso degenere. Supponiamo ora che il sistema si trovi in uno stato elettronico $\epsilon_n(\mathbf{X})$ che presenti una degenerazione di ordine N. Cambiando la notazione in modo molto ragionevole indichiamo con $\phi_{n,a}(\mathbf{X},\mathbf{x})$, $a = 1,\dots,N$ gli autostati elettronici corrispondenti. Lo stato delle variabili nucleari è descritto mediante le N funzioni d'onda $\psi^E_{n,a}(\mathbf{X})$, $a = 1,\dots,N$, ovvero mediante la funzione d'onda

$$\Psi^E_n(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} \psi^E_{n,1}(\mathbf{X}) \\ \psi^E_{n,2}(\mathbf{X}) \\ \vdots \\ \psi^E_{n,N}(\mathbf{X}) \end{pmatrix}.$$

La (A.9) si riduce allora ad un'equazione di Schroedinger matriciale di dimensione pari alla degenerazione del livello $\epsilon_n(\mathbf{X})$

$$\left\{\frac{1}{2M}\sum_I (\mathbb{1}_N \mathbf{P}_I - \mathcal{A}_I(\mathbf{X}))^2 + \mathbb{1}_N \epsilon_n(\mathbf{X})\right\}\Psi^E_n(\mathbf{X}) = E\Psi^E_n(\mathbf{X}) \tag{A.17}$$

dove $\epsilon_n(\mathbf{X})$ compare ancora come un termine di potenziale e la dinamica risulta accoppiata ad un campo di gauge $U(N)$ rappresentato dal potenziale vettore $\mathcal{A}_I(\mathbf{X})$ rappresentato in ogni punto dalla matrice[5]

$$\mathcal{A}^{ab}_I(\mathbf{X}) = i\hbar \int \overline{\phi_{n,a}(\mathbf{X},\mathbf{x})}\,\frac{\partial}{\partial \mathbf{X}^I}\phi_{n,b}(\mathbf{X},\mathbf{x})\,d\mathbf{x}\,. \tag{A.18}$$

La dinamica efficace dei gradi di libertà nucleari in corrispondenza ad uno stato elettronico che presenta una degenerazione di ordine N è pertanto descritta da una equazione di Schroedinger matriciale in interazione minimale con un campo di gauge $U(N)$ descritto dal potenziale vettore $\mathcal{A}_I(\mathbf{X})$ e con il potenziale $\epsilon_n(\mathbf{X})$.

Vale la pena porre nuovamente l'accento sul fatto che il potenziale vettore (A.18) non rappresenta un campo di forza reale ma descrive, nel regime adiabatico, l'interazione tra gradi di libertà elettronici e nucleari.

L'apparire di strutture di gauge, abeliane e non, in una teoria che inizialmente non ne presentava traccia alcuna rappresenta senza dubbio un fatto sorprendente. Per capire più a fondo il meccanismo che produce l'accoppiamento con campi di gauge nella dinamica nucleare efficace torniamo a considerare un'istante l'equazione (A.9) che, come abbiamo già avuto modo di sottolineare, risulta del tutto equivalente all'equazione di Schroedinger (A.1) da cui siamo partiti. Poiché nell'Hamiltoniano (A.2) non

[5] Negli operatori $\mathbf{P}$ è sottinteso un fattore δ_{ab} rispetto agli indici di gauge.

compare alcun accoppiamento con campi di gauge è ragionevole sospettare che il potenziale vettore (A.8) che appare nella (A.10) sia prodotto unicamente da una peculiare scelta della gauge e possa pertanto essere annullato mediante un'opportuna trasformazione. In effetti il calcolo del campo di gauge $\mathcal{F}_{IJ}$ (Eq. (A.13)) associato al potenziale (A.8) produce un risultato identicamente nullo, mostrando che questo è di fatto il caso. Nell'equazione (A.9) non compare pertanto alcun accoppiamento con un campo di gauge esterno ed il potenziale vettore (A.8) è, come si dice, una *pura gauge*. La presenza del potenziale vettore $\mathcal{A}_I^{mn}$ nell'Hamiltoniano (A.10) è un artificio prodotto unicamente dal modo in cui abbiamo scelto di rappresentare gli stati del sistema e può essere annullata mediante un'opportuna trasformazione di gauge. Sia $U(X)$ la matrice unitaria che realizza la trasformazione di gauge

$$\text{(A.19)} \qquad \begin{cases} \psi_m^E(X) & \rightarrow & \psi_m^E{}'(X) = \sum_n U_{mn}(X)\psi_n^E(X) \\ \mathcal{A}_I^{mn}(X) & \rightarrow & \mathcal{A}_I^{mn}{}'(X) = 0 \end{cases} .$$

Operando questa trasformazione l'Hamiltoniano (A.10) deve essere sostituito dall'operatore

$$\text{(A.20)} \qquad H'_{mn} = \frac{\delta_{mn}}{2M}\sum_I P_I^2 + \sum_l U_{ml}(X)\epsilon_l(X)U^\dagger_{ln}(X).$$

In questo Hamiltoniano non compare più l'accoppiamento minimale con un campo di gauge esterno. D'altro canto, il termine di potenziale non risulta più in forma diagonale, cosicché non viene fatto nessun passo avanti nella semplificazione delle equazioni del moto.

La trasformazione di gauge (A.19) produce inoltre un effetto poco gradevole sull'interpretazione fisica della teoria. Le nuove funzioni d'onda $\phi'_m(X,x) = \sum_n \phi_n(X,x)\, U_{nm}(X)$, $m = 0, 1, \ldots$, non costituiscono più una base di autostati per l'Hamiltoniana elettronica $h(X)$. Pertanto non è più possibile identificare le $\phi'_m(X,x)$ con le funzioni d'onda elettroniche individuate dal parametro X e le $\psi_m^E{}'(X)$ con le funzioni d'onda che descrivono lo stato nucleare corrispondente alla configurazione elettronica $\epsilon_m(X)$. Non avrebbe quindi alcun senso applicare l'approssimazione (A.14) in questa gauge. Per procedere all'approssimazione adiabatica è necessario rappresentare gli stati del sistema come nella (A.6), con $\phi_m(X,x)$ autostati di $h(X)$, ed in questa rappresentazione il valore del potenziale vettore (A.8) risulta in generale diverso da zero.

Nel limite adiabatico l'invarianza di gauge (A.11)-(A.12), viene rotta e risulta possibile mischiare tra loro unicamente stati elettronici relativi ad una stessa energia. L'approssimazione (A.14) spezza la matrice (A.8) in sottoblocchi del tipo (A.16) e (A.18) rappresentanti campi di gauge autentici, rispettivamente abeliani e non, che compaiono nella descrizione

della dinamica nucleare efficace. Nel prossimo paragrafo vedremo come il campo di gauge $\mathcal{F}_{IJ}$ relativo al potenziale vettore (A.18) risulti in generale diverso da zero.

A.2.2. Il campo di monopolo della molecola biatomica. Il significato fisico dei campi di gauge indotti nella dinamica nucleare efficace dalla separazione dei gradi di libertà elettronici può essere capito agevolmente analizzando lo spettro del sistema più semplice che si presta a questo tipo di studio, la molecola biatomica [**MSW86**]. Consideriamo pertanto una molecola costituita da due nuclei di massa uguale M ed un numero arbitrario di elettroni di massa m_e ($M >> m_e$). Separate le coordinate del centro di massa, parametrizziamo il sistema mediante il vettore $\mathbf{X}$, che indica la posizione relativa dei due nuclei, e le coordinate degli elettroni $\mathbf{x}_i$, $i = 1, 2, \ldots$, relative ad un sistema di riferimento solidale al centro di massa. La dinamica del sistema risulta allora descritta dall'Hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2\mu}\mathbf{P}^2 + \frac{1}{2m}\sum_i \mathbf{p}_i{}^2 + V(\mathbf{X};\mathbf{x}), \tag{A.21}$$

dove $\mathbf{P} = -i\hbar\partial/\partial\mathbf{X}$ e $\mathbf{p}_i = -i\hbar\partial/\partial\mathbf{x}_i$ rappresentano gli operatori momento coniugati alle variabili $\mathbf{X}$ e $\mathbf{x}_i$, $\mu = M/2$ è la massa ridotta dei due nuclei, $m = (1 + m_e/2M)\, m_e \simeq m_e$; $V(\mathbf{X};\mathbf{x})$ comprende il potenziale di interazione coulombiana nucleo-nucleo, nucleo-elettrone ed elettrone-elettrone. Indicato con Z il numero atomico dei due nuclei

$$V(\mathbf{X};\mathbf{x}) = \frac{(Ze)^2}{|\mathbf{X}|} - \sum_i \frac{Ze^2}{|\frac{1}{2}\mathbf{X} - \mathbf{x}_i|} - \sum_i \frac{Ze^2}{|\frac{1}{2}\mathbf{X} + \mathbf{x}_i|} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|}.$$

All'Hamiltoniano (A.21) dovranno essere aggiunti eventualmente altri termini per tenere conto dell'interazione spin-orbita, degli effetti relativistici e di altri effetti legati alla struttura fine delle righe spettrali.

Classificazione degli stati elettronici. Come nel paragrafo precedente i gradi di libertà nucleari $\mathbf{X}$ devono essere identificati con i parametri adiabatici che regolano la dinamica elettronica. Per procedere nell'approssimazione adiabatica è allora necessario discutere con un minimo di dettaglio le proprietà di autovalori ed autofunzioni del sistema di elettroni in moto nel campo generato dai due nuclei, ovvero trovare la soluzione al problema agli autovalori per l'Hamiltoniano elettronico

$$h(\mathbf{X}) = \frac{1}{2m}\sum_i \mathbf{p}_i{}^2 + V(\mathbf{X};\mathbf{x}) \tag{A.22}$$

in corrispondenza ad ogni configurazione assegnata delle variabili $\mathbf{X}$.

La classificazione degli stati elettronici di una molecola biatomica viene effettuata mediante criteri simili a quelli utilizzati nella descrizione dei livelli energetici degli atomi a molti elettroni. Se ne differenzia tuttavia per alcune caratteristiche importanti. Anzitutto nella spettroscopia molecolare non compaiono serie tipo quella di Rydberg, cosicché l'equivalente del numero quantico principale della fisica atomica non risulta rilevante in fisica molecolare. In secondo luogo, visto che il campo creato dai due nuclei non gode di simmetria sferica, il momento angolare orbitale del sistema di elettroni non viene conservato e non costituisce un buon numero quantico per la descrizione degli spettri. Per capire quali siano i numeri quantici più adatti alla classificazione degli stati elettronici della molecola biatomica analizziamo le simmetrie del sistema

a) $\boldsymbol{\Lambda}$: L'asse congiungente i due nuclei, $\mathbf{n} = \mathbf{X}/|\mathbf{X}|$, costituisce un asse di simmetria per la molecola. La proiezione del momento angolare orbitale del sistema di elettroni, $\mathbf{L}^{el}$, lungo quest'asse è pertanto una quantità conservata ed il corrispondente numero quantico può essere utilizzato nella classificazione degli stati del sistema. Si è soliti indicare con Λ il valore assoluto della proiezione del momento angolare orbitale elettronico lungo l'asse della molecola. Λ può assumere i valori $0, 1, 2, \ldots$, ed i corrispondenti stati molecolari vengono detti di tipo $\Sigma, \Pi, \Delta, \ldots$, rispettivamente

$$\begin{array}{rcllll} \Lambda & = & 0, & 1, & 2, & \ldots \\ & & \Sigma, & \Pi, & \Delta, & \ldots \end{array}$$

in analogia con la convenzione utilizzata nella classificazione degli spettri atomici.

b) $\boldsymbol{S}$: Lo spin del sistema di elettroni, $\mathbf{S}^{el}$, è una quantità conservata ed il corrispondente numero quantico S può essere utilizzato nella classificazione degli stati. Lo spin elettronico totale S è dato dalla somma dello spin di ciascun elettrone della molecola e può assumere pertanto sia valori interi che seminteri a seconda che il numero totale di elettroni sia pari o dispari. Il valore del modulo della proiezione dello spin elettronico totale lungo l'asse molecolare $\mathbf{n}$ viene usualmente indicato con la lettera Σ e può assumere i valori

$$\Sigma = -S, -S+1, \ldots, S.$$

c) $\boldsymbol{\Omega}$: La proiezione del momento angolare totale del sistema di elettroni, $\mathbf{J}^{el} = \mathbf{L}^{el} + \mathbf{S}^{el}$, lungo l'asse molecolare è ancora una quantità conservata ed il suo modulo viene indicato mediante il numero quantico Ω. Osserviamo che in virtù dell'isotropia dello spazio questo è il solo numero quantico conservato esattamente. Le proiezioni di $\mathbf{L}^{el}$ ed $\mathbf{S}^{el}$ lungo l'asse della molecola risultano infatti buoni numeri quantici solamente nel limite in cui l'interazione spin-orbita può essere considerata debole. Qualora Λ e Σ risultino ben definiti, per ogni valore fissato di Λ ($\Lambda > \Sigma$), Ω assume i

$2S+1$ valori

$$\Omega = \Lambda + S, \Lambda + S - 1, \ldots, \Lambda - S.$$

d) $\pm$: Il sistema ammette come ulteriore simmetria la riflessione rispetto ad un qualsiasi piano contenente l'asse $\mathbf{n}$. Questa operazione lascia immutata l'energia del sistema ma non gli stati, poiché nella riflessione il segno del momento angolare (vettore polare!) cambia. Se ne deduce che tutti gli stati corrispondenti ad un valore di $\Lambda \neq 0$ sono doppiamente degeneri. Questi stati vengono usualmente classificati mediante il valore della loro parità, $\pm$.

I livelli energetici della molecola biatomica vengono pertanto etichettati mediante i numeri quantici Λ, S ed Ω. Convenzionalmente viene utilizzato il simbolo

$$\epsilon_{\Lambda,S,\Omega}(\mathbf{X}) = {}^{2S+1}(\Lambda)_{\Omega}.$$

Ad esempio i livelli con $\Lambda = 1$ ed $S = 1$ vengono indicati come ${}^3\Pi_0$, ${}^3\Pi_1$, ${}^3\Pi_2$. Per specificare lo stato del sistema è necessario indicare un ulteriore numero quantico, convenzionalmente il valore della parità. Gli stati $\Lambda = 0$ risultano non degeneri, mentre quelli con $\Lambda \neq 0$ sono doppiamente degeneri: all'energia $\epsilon_{\Lambda,S,\Omega}(\mathbf{X})$ corrispondono i due autostati della parità $\phi_{\Lambda,S,\Omega,\pm}(\mathbf{X};\mathbf{x})$. In alternativa alla parità dello stato è possibile assegnare il segno dell'autovalore della proiezione del momento angolare elettronico totale lungo l'asse della molecola. Questo equivale a scegliere come base dell'autospazio degenere gli autovalori di $\mathbf{J}^{\mathrm{el}} \cdot \mathbf{n}$, $\phi_{\Lambda,S,\pm\Omega}(\mathbf{X};\mathbf{x})$ in luogo di quelli della parità. È immediato verificare che le due basi sono legate dalla trasformazione

$$\phi_{\Lambda,S,\Omega,+}(\mathbf{X};\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{\Lambda,S,+\Omega}(\mathbf{X};\mathbf{x}) + \phi_{\Lambda,S,-\Omega}(\mathbf{X};\mathbf{x})\right)$$
$$\phi_{\Lambda,S,\Omega,-}(\mathbf{X};\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{\Lambda,S,+\Omega}(\mathbf{X};\mathbf{x}) - \phi_{\Lambda,S,-\Omega}(\mathbf{X};\mathbf{x})\right) .$$

Dinamica nucleare efficace. Nel paragrafo precedente abbiamo mostrato come la dinamica nucleare efficace in corrispondenza ad uno stato elettronico assegnato, N volte degenere, sia descritta da una teoria di gauge relativa al gruppo $U(N)$. Così nella molecola biatomica, la dinamica nucleare efficace viene descritta da una teoria di gauge $U(1)$ o $SU(2)$ a seconda che gli elettroni si trovino in una configurazione con Λ uguale o diverso da zero. Per $\Lambda = 0$ lo stato dei due nuclei è descritto da una funzione d'onda scalare e la dinamica è governata dall'equazione di Schroedinger (A.15) in interazione minimale con il campo di gauge $U(1)$ rappresentato dal potenziale vettore (A.16) e con il potenziale scalare $\epsilon_{0,S,\Omega}(\mathbf{X})$. Per $\Lambda \neq 0$ lo stato nucleare è invece descritto da una funzione d'onda a due componenti e la dinamica è governata dall'equazione di Schroedinger matriciale (A.17)

in interazione minimale con il campo di gauge $SU(2)$ descritto dal potenziale vettore non abeliano (A.18) e con il potenziale scalare $\mathbb{1}\epsilon_{\Lambda,S,\Omega}(\mathbf{X})$. Nel seguito, per ragioni di semplicità, limiteremo la nostra attenzione alle configurazioni elettroniche della molecola biatomica con spin totale nullo, $S = 0$. Gli autovalori dell'Hamiltoniano elettronico (A.22), sono allora etichettati dal solo numero quantico Λ, $\epsilon_\Lambda(\mathbf{X})$; per $\Lambda = 0$ ad ogni autovalore corrisponderà il solo autovettore $\phi_0(\mathbf{X};\mathbf{x})$, mentre per $\Lambda \neq 0$ sceglieremo come base per l'autospazio i due autostati di $\mathbf{L}^{el} \cdot \mathbf{n}$ corrispondenti ai valori $\pm\Lambda$, $\phi_{\pm\Lambda}(\mathbf{X};\mathbf{x})$. Per valutare la forma dei potenziali vettore (A.16) e (A.18) è necessario conoscere la dipendenza esplicita delle autofunzioni dai parametri $\mathbf{X}$. A tale scopo parametrizziamo il vettore $\mathbf{X}$ mediante il suo modulo $r = |\mathbf{X}|$ e gli angoli θ, φ che individuano il versore $\mathbf{n} = \mathbf{X}/|\mathbf{X}|$; $\mathbf{X} = (r, \mathbf{n})$. Consideriamo ora gli autostati comuni degli operatori $h(r, \epsilon_z)$ ed $\mathbf{L}^{el} \cdot \epsilon_z$, $\phi_{\pm\Lambda}(r, \epsilon_z;\mathbf{x})$. In virtù dell'isotropia dello spazio gli autostati comuni di $h(r, \mathbf{n})$ ed $\mathbf{L}^{el} \cdot \mathbf{n}$ per un qualsiasi $\mathbf{n}$ individuato dagli angoli θ, φ possono essere ottenuti ruotando il sistema in modo che il versore ϵ_z venga a sovrapporsi ad $\mathbf{n}$, ovvero [6]

$$\begin{aligned}
&\phi_{\pm\Lambda}(r, \mathbf{n}(\theta, \varphi);\mathbf{x}) = \\
&\quad = \exp\left\{-i\varphi\frac{L_z^{el}}{\hbar}\right\}\exp\left\{-i\theta\frac{L_y^{el}}{\hbar}\right\}\exp\left\{i\varphi\frac{L_z^{el}}{\hbar}\right\}\phi_{\pm\Lambda}(r, \epsilon_z;\mathbf{x}).
\end{aligned}$$

La dipendenza dagli angoli θ e φ degli autostati elettronici può quindi essere esplicitata completamente e tanto basta per calcolare i potenziali vettore (A.16) ed (A.18).

$\boldsymbol{\Lambda = 0}$. Consideriamo anzitutto il caso in cui il sistema di elettroni abbia momento angolare orbitale nullo. Le componenti del potenziale vettore (A.16) possono essere valutate direttamente come

$$\begin{aligned}
A_r(r, \theta, \varphi) &= i\hbar \int \overline{\phi_0(r, \mathbf{n};\mathbf{x})}\, \frac{\partial}{\partial r}\phi_0(r, \mathbf{n};\mathbf{x})\, d\mathbf{x} \\
&= i\hbar \int \overline{\phi_0(r, \epsilon_z;\mathbf{x})}\, \frac{\partial}{\partial r}\phi_0(r, \epsilon_z;\mathbf{x})\, d\mathbf{x} \\
&= \frac{1}{2} i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \int \overline{\phi_0(r, \epsilon_z;\mathbf{x})}\, \phi_0(r, \epsilon_z;\mathbf{x})\, d\mathbf{x} = 0
\end{aligned}$$

[6] Questa rotazione non è ovviamente ben definita per $\theta = \pi$. Per procedere in modo rigoroso è necessario ricoprire la superficie della sfera mediante due carte coordinante e definire la funzione $\phi_{\pm\Lambda}(r, \mathbf{n};\mathbf{x})$ in ciascuna carta mediante un'opportuna rotazione. Sull'intersezione delle due carte le due espressioni della funzione d'onda differiscono unicamente per una scelta della gauge ed è possibile dare un significato globale all'intera teoria. Nel seguito concentreremo la nostra attenzione sull'espressione locale della funzione d'onda e dei campi, lasciando le questioni globali per un ulteriore approfondimento.

tenendo conto che gli autostati $\phi_0(r, \epsilon_z; \mathbf{x})$ devono essere normalizzati all'unità per ogni valore del parametro r;

$$\begin{aligned}
A_\theta(r,\theta,\varphi) &= i\hbar \int \overline{\phi_0(r,\mathbf{n};\mathbf{x})}\, \frac{\partial}{\partial\theta}\phi_0(r,\mathbf{n};\mathbf{x})\, d\mathbf{x} \\
&= i\hbar \int \overline{\phi_0(r,\epsilon_z;\mathbf{x})}\, \exp\left\{-i\varphi\frac{L_z^{el}}{\hbar}\right\} \exp\left\{i\theta\frac{L_y^{el}}{\hbar}\right\} \\
&\quad \times \frac{\partial}{\partial\theta} \exp\left\{-i\theta\frac{L_y^{el}}{\hbar}\right\} \exp\left\{i\varphi\frac{L_z^{el}}{\hbar}\right\} \phi_0(r,\epsilon_z;\mathbf{x})\, d\mathbf{x} \\
&= \int \overline{\phi_0(r,\epsilon_z;\mathbf{x})}\, L_y\, \phi_0(r,\epsilon_z;\mathbf{x})\, d\mathbf{x} = 0
\end{aligned}$$

dove abbiamo utilizzato le regole di selezione dell'operatore L_y per valutare l'elemento di matrice nell'ultima riga; infine

$$\begin{aligned}
A_\varphi(r,\theta,\varphi) &= i\hbar \int \overline{\phi_0(r,\mathbf{n};\mathbf{x})}\, \frac{\partial}{\partial\varphi}\phi_0(r,\mathbf{n};\mathbf{x})\, d\mathbf{x} \\
&= i\hbar \int \overline{\phi_0(r,\epsilon_z;\mathbf{x})}\, \exp\left\{-i\varphi\frac{L_z^{el}}{\hbar}\right\} \exp\left\{i\theta\frac{L_y^{el}}{\hbar}\right\} \exp\left\{i\varphi\frac{L_z^{el}}{\hbar}\right\} \\
&\quad \times \frac{\partial}{\partial\varphi} \exp\left\{-i\varphi\frac{L_z^{el}}{\hbar}\right\} \exp\left\{-i\theta\frac{L_y^{el}}{\hbar}\right\} \exp\left\{i\varphi\frac{L_z^{el}}{\hbar}\right\} \phi_0(r,\epsilon_z;\mathbf{x})\, d\mathbf{x} \\
&= \int \overline{\phi_0(r,\epsilon_z;\mathbf{x})}\, \exp\left\{-i\varphi\frac{L_z^{el}}{\hbar}\right\} \exp\left\{i\theta\frac{L_y^{el}}{\hbar}\right\} \\
&\quad \times L_z^{el} \exp\left\{-i\theta\frac{L_y^{el}}{\hbar}\right\} \exp\left\{i\varphi\frac{L_z^{el}}{\hbar}\right\} \phi_0(r,\epsilon_z;\mathbf{x})\, d\mathbf{x} + \\
&\quad - \int \overline{\phi_0(r,\epsilon_z;\mathbf{x}y)}\, L_z^{el}\, \phi_0(r,\epsilon_z;\mathbf{x}y)\, d\mathbf{x} \\
&= \int \overline{\phi_0}\, \left[(\cos\theta - 1)L_z^{el} - \sin\theta(L_x^{el}\cos\varphi + L_y^{el}\sin\varphi)\right] \phi_0\, d\mathbf{x} = 0
\end{aligned}$$

dove abbiamo fatto uso della relazione generale

$$\exp\left\{i\alpha\frac{L_i}{\hbar}\right\} L_j \exp\left\{-i\alpha\frac{L_i}{\hbar}\right\} = L_j\cos\alpha - \epsilon_{ijk}L_k\sin\alpha\,,$$

ed ancora delle regole di selezione degli operatori L_x ed L_y. Il potenziale vettore (A.16) per una molecola biatomica i cui elettroni si trovano in uno stato a momento angolare orbitale zero [7] risulta quindi identicamente nullo e così il corrispondente campo di gauge. La teoria di gauge $U(1)$ che

[7] Per ragioni di semplicità ci siamo qui limitati agli stati elettronici con momento di spin nullo. Nel caso generale la teoria di gauge che descrive il moto nucleare risulterà banale qualora il momento angolare totale del sistema di elettroni si annulli.

descrive il moto nucleare risulta quindi banale e diviene irrilevante al fine del calcolo dello spettro del sistema. La dinamica nucleare efficace viene descritta dall'equazione di Schroedinger scalare (A.15) cui corrisponde l'Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_0^{nuc} = \frac{1}{2\mu}\mathbf{P}^2 + \epsilon_0(r).$$

Osserviamo che in virtù dell'isotropia dello spazio gli autovalori dell'Hamiltoniano elettronico (A.22), $\epsilon_\Lambda(\mathbf{X})$, possono dipendere unicamente dalla variabile r.

$\boldsymbol{\Lambda \neq 0}$. Supponiamo ora che il sistema di elettroni possieda un momento angolare orbitale Λ diverso da zero. Il potenziale vettore (A.18) che compare nella dinamica nucleare efficace è allora rappresentato da una matrice 2×2 i cui elementi possono essere valutati in modo del tutto simile al caso precedente

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_r^{ab}(r,\theta,\varphi) &= i\hbar \int \overline{\phi_a(r,\epsilon_z;\mathbf{x})}\,\frac{\partial}{\partial r}\phi_b(r,\epsilon_z;\mathbf{x})\,d\mathbf{x} \\
\mathcal{A}_\theta^{ab}(r,\theta,\varphi) &= \int \overline{\phi_a(r,\epsilon_z;\mathbf{x})}\,L_y^{el}\phi_b(r,\epsilon_z;\mathbf{x})\,d\mathbf{x} \\
\mathcal{A}_\varphi^{ab}(r,\theta,\varphi) &= \int \overline{\phi_a(r,\epsilon_z;\mathbf{x})}\,\big[(\cos\theta-1)L_z^{el} + \\
&\quad - \sin\theta(L_x^{el}\cos\varphi + L_y^{el}\sin\varphi)\big]\,\phi_b(r,\epsilon_z;\mathbf{x})\,d\mathbf{x}
\end{aligned}$$

dove a, b assumono i valori $+\Lambda$ e $-\Lambda$. Le componenti $\mathcal{A}_r^{ab}$ ed $\mathcal{A}_\theta^{ab}$ risultano ancora identicamente nulle [8], mentre la componente $\mathcal{A}_\varphi^{ab}$ assume un valore diverso da zero

$$\begin{aligned}
&\mathcal{A}_r^{ab} = \mathcal{A}_\theta^{ab} = 0, \\
&\mathcal{A}_\varphi^{ab} = \begin{pmatrix} -\Lambda(1-\cos\theta) & 0 \\ 0 & \Lambda(1-\cos\theta) \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{A.23}$$

Per assicurarci che la teoria di gauge non sia ancora banale, ovvero che il potenziale vettore (A.23) non sia una gauge pura, calcoliamo il valore del campo di gauge $\mathcal{F}_{ij}^{ab}$ mediante la relazione (A.13). Un breve calcolo conduce immediatamente all'espressione

$$\begin{aligned}
&\mathcal{F}_{\theta\varphi}^{ab} = \begin{pmatrix} -\Lambda\sin\theta & 0 \\ 0 & \Lambda\sin\theta \end{pmatrix} \\
&\mathcal{F}_{\varphi r}^{ab} = \mathcal{F}_{r\theta}^{ab} = 0,
\end{aligned}$$

[8] L'annullamento delle componenti non diagonali della matrice $\mathcal{A}_r^{ab}$ è garantita dalla commutatività degli operatori $\partial/\partial r$ ed L_z^{el}. Lo stato $\partial\phi_b(r,\epsilon_z;\mathbf{x})/\partial r$ è ancora un autostato di L_z^{el} corrispondente all'autovalore b ed è pertanto ortogonale a $\phi_a(r,\epsilon_z;\mathbf{x})$ per $a \neq b$.

che può essere riscritta in modo compatto utilizzando la matrice di Pauli σ_3 come $\mathcal{F}^{ab}_{\theta\varphi} = -\Lambda \sin\theta \sigma^{ab}_3, \mathcal{F}^{ab}_{\varphi r} = \mathcal{F}^{ab}_{r\theta} = 0$.

Possiamo visualizzare l'andamento del campo osservando che gli elementi di matrice di $\mathcal{A}^{ab}_{ij}$ ed $\mathcal{F}^{ab}_{ij}$ sono identici al potenziale vettore ed al campo magnetico generati da una carica di monopolo di intensità $\pm\Lambda$ posta nell'origine del sistema di coordinate. Il calcolo del campo vettoriale corrispondente al tensore $\mathcal{F}^{ab}_{ij}$ (lo spazio delle configurazioni delle variabili nucleari è tridimensionale!) conduce infatti all'espressione

$$\boldsymbol{\mathcal{F}} = -\frac{\Lambda}{r^2}\mathbf{n}\sigma_3 \tag{A.24}$$

che, a parte la presenza della matrice σ_3, coincide con quella del campo generato da una carica di monopolo di intensità $\pm\Lambda$. È importante sottolineare che questa analogia è strettamente formale. Anzitutto il campo di monopolo (A.24) non è di natura elettromagnetica, bensì trae la sua origine dall'interazione adiabatica delle variabili nucleari con quelle elettroniche. In secondo luogo nella nostra teoria i *monopoli* appaiono sempre in coppie e con carica opposta, $+\Lambda$ e $-\Lambda$. Il fatto che il campo (A.24) abbia forma diagonale dipende esclusivamente dalla scelta della gauge, ovvero dalla decisione di descrivere gli stati elettronici mediante autostati di $\mathbf{L}\cdot\mathbf{n}$. Una scelta differente, ad esempio quella degli autostati della parità, avrebbe condotto ad una diversa espressione del campo.

La dinamica nucleare efficace viene descritta dall'equazione di Schroedinger matriciale (A.17) che, nella gauge scelta, si separa in due equazioni scalari del tutto identiche a quella che descrive il moto di una particella in interazione con un campo di monopolo di carica $\pm\Lambda$ e con il potenziale centrale $\epsilon_\Lambda(r)$

$$\begin{pmatrix} \mathcal{H}^{nuc}_{-\Lambda} & 0 \\ 0 & \mathcal{H}^{nuc}_{\Lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi^E_{+\Lambda}(\mathbf{X}) \\ \psi^E_{-\Lambda}(\mathbf{X}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi^E_{+\Lambda}(\mathbf{X}) \\ \psi^E_{-\Lambda}(\mathbf{X}) \end{pmatrix},$$

dove $\mathcal{H}^{nuc}_{\pm\Lambda}$ rappresenta l'Hamiltoniano

$$\mathcal{H}^{nuc}_{\pm\Lambda} = \frac{1}{2\mu}\left(\mathbf{P} - \mathbf{A}^{\pm\Lambda}(\mathbf{X})\right)^2 + \epsilon_\Lambda(r)$$

con $\mathbf{A}^{\pm\Lambda}(\mathbf{X})$ il potenziale vettore di un campo di monopolo di carica $\pm\Lambda$. In coordinate sferiche $A^{\pm\Lambda}_r(\mathbf{X}) = A^{\pm\Lambda}_\theta(\mathbf{X}) = 0$, $A^{\pm\Lambda}_\varphi(\mathbf{X}) = \pm\Lambda(1-\cos\theta)$. È da rilevare che il solo effetto prodotto dal campo di monopolo è quello di quantizzare il momento angolare orbitale del sistema, in questo caso il momento angolare orbitale totale della molecola $\mathbf{L}^{tot}$, come

$$l^{tot} = \Lambda, \Lambda+1, \Lambda+2, \ldots$$

ovvero di cancellare dallo spettro del momento angolare i primi Λ stati. L'interpretazione di questo fatto è immediata. Nello studio dello spettro del sistema abbiamo separato i gradi di libertà nucleari ed elettronici riducendo il problema all'analisi del moto nucleare in corrispondenza ad una configurazione elettronica fissata. Se in quella configurazione il sistema di elettroni possiede un momento angolare Λ, il momento angolare totale del sistema non potrà mai essere minore di questo valore. Il campo di monopolo indotto nella dinamica nucleare efficace dall'approssimazione adiabatica tiene conto proprio di questo effetto.

Nel caso particolarmente semplice della molecola biatomica la presenza di un campo di gauge indotto nella dinamica delle variabili *lente*, quelle nucleari, dall'interazione adiabatica con le variabili *veloci*, quelle elettroniche, ammette pertanto un'interpretazione intuitiva diretta.

A.3. Un esperimento con i fotoni

Presentiamo qui l'analisi teorica di un interessante esperimento descritto qualitativamente in [**Hor92**]. Si tratta di un'applicazione molto istruttiva alla fisica dei fotoni delle regole della MQ. Il formalismo adottato è quello più pertinente degli operatori di creazione e annichilazione (vedi §12.3.6), anche se potrebbe essere trascritto nel linguaggio della Teoria dei Quanti discussa al cap. 5. L'importante è non cadere nell'errore di immaginare un fotone come una vera e propria particella governata dalla MQ alla stregua di un elettrone nonrelativitico. Il numero di fotoni non è una variabile classica, per cui esiste in generale una coerenza quantomeccanica tra stati con un numero diverso di fotoni (vedi sotto).

Un convertitore verso il basso è un particolare tipo di lente capace di produrre due raggi laser a partire da un singolo raggio laser. I due raggi finali hanno uguale intensità e una frequenza pari alla metà di quello iniziale. Inoltre il dispositivo funziona fino ad intensità così basse da dividere di fatto un fotone alla volta: esso produce cioè due fotoni di energia $\hbar\nu/2$ a partire da un singolo fotone di energia $\hbar\nu$. Il punto fondamentale è stabilire esattamente qual è lo stato quantomeccanico dei due fotoni emergenti. Per meglio apprezzare la questione, conviene considerare un esperimento reale di interferometria, effettuato da R. A. Chiao all'Università di Berkeley (si veda "Le Scienze" n. 289 del settembre 1992): coppie di fotoni con identica polarizzazione vengono generati da un convertitore verso il basso, sono riflessi da specchi in modo da convergere nuovamente su un divisore di fascio (cioè uno specchio semitrasparente), ed infine giungono a due rivelatori (vedi Fig. A-1 a p. 471). Lungo una delle due traiettorie è posto un variatore di cammino ottico, il quale introduce uno sfasamento ϕ tra i due fotoni. Un contatore di coincidenze registra una

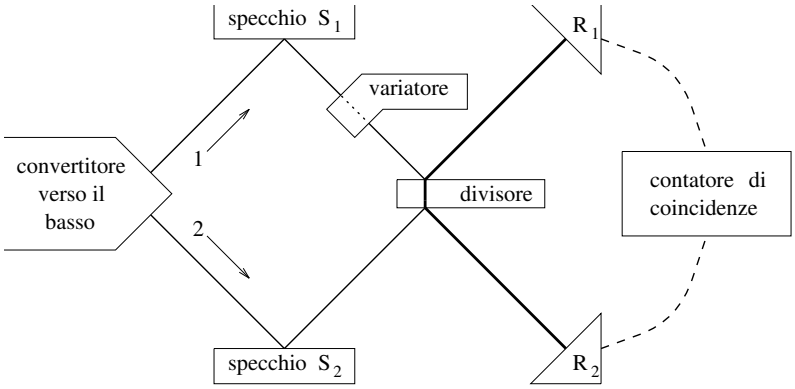


FIGURA A-1. *Schema dell'apparato sperimentale per l'esperimento di coincidenza di fotoni.*

figura di interferenza, in funzione dello sfasamento ϕ, nella frequenza delle rivelazioni simultanee fatte dai due rivelatori. Il problema consiste nel fornire una descrizione quantitativa dell'esperimento sia al livello classico che a quello quantistico. Classicamente, la radiazione luminosa non è risolubile nei singoli fotoni che la compongono, per cui l'interferenza delle coincidenze non costituisce neppure una osservabile. D'altro lato, possiamo facilmente calcolare l'intensità della radiazione raccolta dai due rivelatori. Si tratta di tenere presenti le regole dell'ottica sulla riflessione e trasmissione della luce attraverso gli specchi semitrasparenti: il fascio riflesso risulta sfasato di $\pi/2$ rispetto a quello trasmesso ed entrambi hanno per definizione un'intensità pari alla metà del fascio di luce incidente. Se inoltre teniamo conto dello sfasamento ϕ introdotto dal variatore di cammino ottico, otteniamo subito

$$I_1 = \frac{I}{2}\left|\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{i}{\sqrt{2}}e^{i\phi}\right|^2 = \frac{I}{2}(1 - \sin\phi)$$
$$I_2 = \frac{I}{2}\left|\frac{i}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi}\right|^2 = \frac{I}{2}(1 + \sin\phi)$$

dove I è l'intensità del fascio originale, prima del convertitore verso il basso. Quantisticamente dobbiamo invece ragionare in termini di fotoni. Tenendo conto che i due fotoni sono polarizzati nello stesso modo, possiamo denotare con $a_1^\dagger$, a_1 la coppia di operatori di creazione ed annichilazione di fotoni nella direzione 1 (corrispondente al rivelatore R_1) e con $a_2^\dagger$, a_2 quella nella direzione 2 (corrispondente al rivelatore R_2). Quindi abbiamo le seguenti regole (tratte direttamente all'ottica) per descrivere quello che accade dopo il convertitore verso il basso.

a) Passaggio dei fotoni in direzione 2 attraverso il variatore di cammino ottico: $a_2^\dagger \to e^{i\phi}\, a_2^\dagger$.
b) Riflessione sugli specchi S_1 e S_2: $a_1^\dagger \to a_2^\dagger$ e $a_2^\dagger \to a_1^\dagger$.
c) Semiriflessione sul divisore di fascio:

$$a_1^\dagger \to \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a_1^\dagger + i a_2^\dagger\right) \quad \text{e} \quad a_2^\dagger \to \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a_2^\dagger + i a_1^\dagger\right) .$$

Non ci resta che descrivere lo stato iniziale dei due fotoni emergenti dal convertitore verso il basso. Si tratta proprio del punto più sottile, dove il principio di sovrapposizione lineare gioca un ruolo fondamentale. Il convertitore verso il basso agisce per ciascuno dei due fotoni prodotti come uno specchio semitrasparente, nel senso che esso preserva la coerenza quantomeccanica che era propria del singolo fotone iniziale, senza effettuare alcuna "riduzione del pacchetto d'onda". In altre parole esso non agisce come un rivelatore, il quale emetterebbe un fotone in direzione 1 ed uno in direzione 2, producendo $a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle$ come stato iniziale dei due fotoni. Al contrario, i due fotoni emergenti dal convertitore verso il basso si trovano entrambi nel medesimo stato puro di singola particella nel quale il fotone viaggerebbe con probabilità $1/2$ in direzione 1 e con la stessa probabilità in direzione 2. Questo stato puro di singola particella è evidentemente descritto dal vettore $2^{-1/2}\left(a_1^\dagger + a_2^\dagger\right)|0\rangle$. Dunque lo stato iniziale dei due fotoni è descritto dal vettore

$$|\psi_i\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(a_1^\dagger + a_2^\dagger\right)^2 |0\rangle$$

Con le regole dell'ottica soprascritte, possiamo ora calcolare lo stato finale, appena prima dei contatori:

$$\begin{aligned} |\psi_i\rangle &\longrightarrow \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(a_1^\dagger + e^{i\phi} a_2^\dagger\right)^2 |0\rangle \\ &\longrightarrow \frac{1}{4\sqrt{2}}\left[a_1^\dagger + i a_2^\dagger + e^{i\phi}\left(a_2^\dagger + i a_1^\dagger\right)\right]^2 |0\rangle \\ &\longrightarrow \left[c_{11}\frac{(a_1^\dagger)^2}{\sqrt{2}} + c_{12} a_1^\dagger a_2^\dagger + c_{22}\frac{(a_2^\dagger)^2}{\sqrt{2}}\right]|0\rangle \end{aligned} \tag{A.1}$$

dove

$$c_{11} = \tfrac{1}{4}\left(1 + i e^{i\phi}\right) , \quad c_{12} = \tfrac{i}{2\sqrt{2}}\left(1 + e^{2i\phi}\right) , \quad c_{22} = \tfrac{1}{4}\left(i + e^{i\phi}\right)$$

Quindi le probabilità di osservare due fotoni in un rivelatore e zero nell'altro valgono

$$\begin{aligned} \mathrm{Pr}_{20} &= |c_{11}|^2 = \tfrac{1}{4}(1 - \sin\phi)^2 \\ \mathrm{Pr}_{02} &= |c_{22}|^2 = \tfrac{1}{4}(1 + \sin\phi)^2 , \end{aligned}$$

mentre la probabilità di osservare un fotone in entrambi i rivelatori (ovvero la probabilità del fenomeno di coincidenza) vale

$$\mathrm{Pr}_{11} = |c_{12}|^2 = \tfrac{1}{2}\cos^2\phi = 1 - \mathrm{Pr}_{20} - \mathrm{Pr}_{02}$$

e rappresenta la figura di interferenza classicamente inosservabile. L'intensità relativa della luce raccolta nei due rivelatori si calcola ora immediatamente

$$\frac{I_1}{I} = \mathrm{Pr}_{20} + \tfrac{1}{2}\mathrm{Pr}_{11} = \tfrac{1}{2}(1 - \sin\phi)$$
$$\frac{I_2}{I} = \mathrm{Pr}_{02} + \tfrac{1}{2}\mathrm{Pr}_{11} = \tfrac{1}{2}(1 + \sin\phi)$$

e coincide con il risultato classico, come richiesto dal principio di corrispondenza.

Questo esperimento di interferometria quantistica è stato ulteriormente sviluppato dal gruppo di Berkeley nel seguente modo. Su uno dei due cammini ottici, diciamo quello nella direzione 1, viene interposto un variatore di polarizzazione tra lo specchio $S2$ e il divisore di fascio. Se i fotoni emergenti sono polarizzati in una direzione ruotata di un angolo θ rispetto a quella originaria, dobbiamo aggiungere la nuova regola di trasformazione $a_1^\dagger \longrightarrow a_1^\dagger \cos\theta + b_1^\dagger \sin\theta$, dove gli operatori $b_1^\dagger$ e b_1 creano e distruggono fotoni polarizzati in modo ortogonale rispetto a quelli creati e distrutti dagli operatori $a_j^\dagger$ e a_j, $j = 1, 2$. Le modifiche da fare all'Eq. A.1 sono immediate e per lo stato finale si trova

$$|\psi_f\rangle = \tfrac{1}{4\sqrt{2}}\left[\left(\cos\theta + ie^{i\phi}\right)a_1^\dagger + \left(i\cos\theta + e^{i\phi}\right)a_2^\dagger + \sin\theta\left(b_1^\dagger + ib_2^\dagger\right)\right]^2|0\rangle$$

Se i rivelatori non sono sensibili alla polarizzazione, i conteggi sono *inclusivi* rispetto al tipo, a o b, di fotoni rivelati e si ottengono quindi le probabilità, o frequenze relative di conteggio, come somma dei moduli quadri relativi a ciascuna possibilità,

$$\begin{aligned}
\mathrm{Pr}_{20} &= \left|\langle 0|\frac{a_1^2}{\sqrt{2}}|\psi_f\rangle\right|^2 + \left|\langle 0|\frac{b_1^2}{\sqrt{2}}|\psi_f\rangle\right|^2 + |\langle 0|a_1 b_1|\psi_f\rangle|^2 \\
&= \tfrac{1}{4}(1 - \cos\theta\,\sin\phi)^2 \\
\mathrm{Pr}_{02} &= \left|\langle 0|\frac{a_2^2}{\sqrt{2}}|\psi_f\rangle\right|^2 + \left|\langle 0|\frac{b_2^2}{\sqrt{2}}|\psi_f\rangle\right|^2 + |\langle 0|a_2 b_2|\psi_f\rangle|^2 \\
&= \tfrac{1}{4}(1 + \cos\theta\,\sin\phi)^2 \\
\mathrm{Pr}_{11} &= |\langle 0|a_1 a_2|\psi_f\rangle|^2 + |\langle 0|b_1 b_2|\psi_f\rangle|^2 + |\langle 0|a_1 b_2|\psi_f\rangle|^2 + |\langle 0|a_2 b_1|\psi_f\rangle|^2 \\
&= \tfrac{1}{2}(\sin^2\theta + \cos^2\theta\,\cos^2\phi)
\end{aligned}$$

(si osservi che vale ancora la completa normalizzazione, $\mathrm{Pr}_{20}+\mathrm{Pr}_{02}+\mathrm{Pr}_{11} = 1$, poiché abbiamo tacitamente assunto che il variatore di polarizzazione abbia efficienza ideale). Si noti in particolare che nel caso di una rotazione di $\pi/2$ della polarizzazione, $\cos\theta = 0$ e le suddette probabilità non dipendono più dallo sfasamento ϕ. In tal caso la diversa polarizzazione dei due fotoni permette di stabilire il percorso seguito e non rimane quindi alcuna traccia della figura di interferenza.

Possiamo però rendere i rivelatori *esclusivi* rispetto alla polarizzazione interponendo davanti a loro degli opportuni filtri polarizzatori. Se questi lasciano passare solo fotoni creati rispettivamente dagli operatori $a_1 \cos\alpha + b_1 \sin\alpha$ e $a_2 \cos\alpha + b_2 \sin\alpha$ (α è l'angolo formato dall'asse dei nuovi polarizzatori con l'asse della polarizzazione originale, quella corrispondente agli operatori $a_1^\dagger$ e $a_2^\dagger$), le diverse probabilità si calcolano come moduli quadri delle opportune somme di ampiezze

$$\begin{aligned}
\mathrm{Pr}_{20} &= \left|\langle 0| \frac{1}{\sqrt{2}} (a_1 \cos\alpha + b_1 \sin\alpha)^2 |\psi_f\rangle\right|^2 \\
&= \tfrac{1}{16}\left[\cos^2\alpha + \cos^2(\alpha-\theta) - 2\cos\alpha\cos(\alpha-\theta)\sin\phi\right]^2 \\
\mathrm{Pr}_{02} &= \left|\langle 0| \frac{1}{\sqrt{2}} (a_2 \cos\alpha + b_2 \sin\alpha)^2 |\psi_f\rangle\right|^2 \\
&= \tfrac{1}{16}\left[\cos^2\alpha + \cos^2(\alpha-\theta) + 2\cos\alpha\cos(\alpha-\theta)\sin\phi\right]^2 \\
\mathrm{Pr}_{11} &= |\langle 0| (a_1 \cos\alpha + b_1 \sin\alpha)(a_2 \cos\alpha + b_2 \sin\alpha) |\psi_f\rangle|^2 \\
&= \tfrac{1}{8}\left[\cos^2\alpha - \cos^2(\alpha-\theta)\right]^2 + \tfrac{1}{2}\cos^2\alpha\cos^2(\alpha-\theta)\sin^2\phi
\end{aligned}$$

e dipendono in generale dall'angolo di sfasamento ϕ (i casi speciali in cui questa dipendenza scompare hanno una spiegazione banale, corrispondendo ai casi in cui uno solo, o addirittura nessuno, dei due cammini ottici resta effettivamente aperto fino a ciascun rivelatore). In particolare, anche se $\theta = \pi/2$, per cui i fotoni prima del divisore di fascio hanno polarizzazioni ortogonali, le frequenze relative di conteggio dipendono ancora da ϕ per α generico. In effetti nessuna osservazione viene effettuata sui fotoni prima del divisore di fascio, e quindi i loro stati di polarizzazione sono descritti da due combinazioni lineari ortogonali dei due autovettori che corrispondono rispettivamente alla trasmissione ed all'assorbimento nei filtri polarizzatori. Le componenti relative alla trasmissione possono quindi ancora interferire. Si noti infine che ora tipicamente $\mathrm{Pr}_{20} + \mathrm{Pr}_{02} + \mathrm{Pr}_{11} \leq 1$, con $1 - \mathrm{Pr}_{20} - \mathrm{Pr}_{02} - \mathrm{Pr}_{11}$ pari alla probabilità che entrambi i fotoni siano assorbiti dai polarizzatori.

APPENDICE B

Ausili matematici

B.1. Elementi di teoria dei gruppi

Lo studio della teoria dei gruppi è importante per tutta la fisica teorica, tuttavia in queste pagine possiamo solo vederne un cenno introduttivo. Rimandiamo per una trattazione più completa a [**Ham62, BC72**].

B.1.1. Gruppi astratti. La struttura di **gruppo** viene così definita: sia $\mathfrak{G}$ un insieme al cui interno è data una **legge di composizione** χ (comunemente denominata "prodotto")

$$\chi : \mathfrak{G} \times \mathfrak{G} \to \mathfrak{G}$$

che soddisfi le condizioni (assiomi)[1]
a) χ è **associativa**:
per ogni $a, b, c \in \mathfrak{G}$ vale la proprietà $\chi(a, \chi(b, c)) = \chi(\chi(a, b), c)$;
b) esiste un elemento e (denominato l'**unità**) tale che $\chi(a, e) = \chi(e, a) = a$;
c) per ogni $a \in \mathfrak{G}$ esiste un unico elemento **inverso** a^{-1} tale che $\chi(a, a^{-1}) = \chi(a^{-1}, a) = e$.

Un gruppo si dice **commutativo** (o *abeliano*) se la composizione interna è commutativa, ossia $\chi(a, b) = \chi(b, a)$. Nel seguito indicheremo [2] il prodotto di elementi come in algebra elementare, $\chi(a, b) \equiv a \cdot b$.

Un gruppo si dice **finito** se l'insieme $\mathfrak{G}$ è formato da un numero finito di elementi, detto l'*ordine* del gruppo, altrimenti è detto *infinito*. Diamo di seguito alcuni esempi di gruppo:
a) $\mathfrak{C}_2 = \{e, x\}$, $x \cdot x = e$ (l'unico gruppo finito di ordine 2).
b) $\mathfrak{C}_N = \{e, x, x^2, \ldots, x^{N-1}\}$, $x^n \cdot x^m = x^{n+m}$, $x^N \equiv e$ (gruppo ciclico a N elementi).
c) $\mathfrak{G}_3 = \{e, a, a^2, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$ con legge di composizione:

$$\begin{aligned} a^3 &= e \\ a \cdot \sigma_j &= \sigma_{j+1}\,, \quad (\sigma_4 \equiv \sigma_1) \\ \sigma_i \cdot \sigma_j &= a^{i-j} \end{aligned}$$

[1] Il lettore matematicamente erudito perdonerà le semplificazioni adottate; in effetti gli assiomi qui introdotti sono in parte sovrabbondanti, ma in questa forma possiamo risparmiare un certo numero di teoremi preliminari.

[2] Sempre per amore di semplicità ometteremo, ove non si generi ambiguità, la dizione "per ogni $a, b \in G$" e simili.

Si noti che questo è il primo esempio di gruppo non-commutativo, infatti, ad es., $\sigma_1 \cdot \sigma_2 \neq \sigma_2 \cdot \sigma_1$.
d) Il *gruppo dei quaternioni*: $(1, -1, i, -i, j, -j, k, -k)$ con legge di composizione $i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -e$.
e) Il gruppo delle permutazioni di n elementi S_n: una qualunque permutazione si può identificare con la matrice

$$\pi \in S_n = \begin{Vmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots & n \\ \pi_1 & \pi_2 & \pi_3 & \dots & \pi_n \end{Vmatrix}$$

(cioè sotto la permutazione 1 è sostituito dal numero π_1, 2 da π_2, etc.).
f) Il gruppo delle trasformazioni lineari inomogenee dello spazio $\mathbb{R}^3$ (rototraslazioni) o gruppo **euclideo** $E(3)$:

$$g = (\Omega, \mathbf{a}) \in \mathfrak{G} : \mathbf{x}' = \Omega\mathbf{x} + \mathbf{a}$$

con Ω matrice ortogonale.
g) Il gruppo $\mathcal{L}$ delle trasformazioni di Lorentz nello spazio-tempo:

$$x^\mu \to x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$$

costituito dalle trasformazioni lineari dello spazio $\mathbb{R}^4$ che lasciano invariante la "lunghezza" $x^2 = (x^0)^2 - \mathbf{x}^2$.
h) Il gruppo $\mathcal{P}$ delle trasformazioni di Poincaré:

$$x^\mu \to x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu + a^\mu$$

costituito dalle trasformazioni lineari dello spazio $\mathbb{R}^4$ che lasciano invariante l'intervallo $(x - y)^2 = (x^0 - y^0)^2 - (\mathbf{x} - \mathbf{y})^2$ tra due eventi qualunque (x, y).

Si dirà che $\mathfrak{G}'$ è un **sottogruppo** di $\mathfrak{G}$ se $\mathfrak{G}'$ è un sottoinsieme di $\mathfrak{G}$ e se il prodotto di due elementi di $\mathfrak{G}'$ è contenuto in $\mathfrak{G}'$. Ad esempio il **gruppo delle rotazioni** $O(3)$, definito dalle trasformazioni lineari di $\mathbb{R}^3$ che lasciano invariante la lunghezza dei vettori ($\mathbf{x}' = \Omega\mathbf{x}$), è un sottogruppo del gruppo euclideo. Il gruppo di Lorentz $\mathcal{L}$ è sottogruppo del gruppo di Poincaré.

B.1.2. Rappresentazioni. Ad una data struttura di gruppo possono corrispondere diverse *realizzazioni* in termini di trasformazioni geometriche o altro. Ad esempio il gruppo delle **permutazioni** S_3 si può caratterizzare in modo astratto dalla legge di composizione (vedi il terzo esempio presentato in precedenza) oppure si può realizzare come le trasformazioni di simmetria di un triangolo equilatero ($a =$ rotazione di 120^0, gli elementi σ_i rappresentano le riflessioni attorno alle tre altezze). Si tratta dello stesso gruppo o se si preferisce di due gruppi *isomorfi*. Il concetto di isomorfismo tra gruppi si definisce nel modo più naturale: $\mathfrak{G}$ e G' sono isomorfi se esiste una corrispondenza biunivoca $\tau : \mathfrak{G} \to \mathfrak{G}'$ tale che $\tau(a \cdot b) = \tau(a) \cdot \tau(b)$ (notare che a rigore dovremmo usare due notazioni differenti per il prodotto in $\mathfrak{G}$ e in $\mathfrak{G}'$). Più in generale, se l'applicazione τ non è biunivoca si parla di **omomorfismo** tra i due gruppi. Qualche esempio vale a fissare le idee: si considerino le applicazioni:
a) $\tau : \mathfrak{G}_3 \to \mathfrak{C}_2$ con $\tau(e) = \tau(a) = \tau(a^2) = e$, $\tau(\sigma_i) = x$
b) $\tau : \mathfrak{G}_3 \to \mathfrak{C}_3$ con $\tau(e) = \tau(\sigma_1) = e$, $\tau(a) = \tau(\sigma_2) = x$, $\tau(a^2) = \tau(\sigma_3) = x^2$.
c) $\tau : E(3) \to O(3)$ con $\tau([\Omega, \mathbf{a}]) = \Omega$.

Si noterà che *l'immagine inversa dell'identità* è sempre un sottogruppo.

Ciò che interessa nelle applicazioni fisiche non è tanto lo studio della struttura astratta dei gruppi quanto la classificazione e la costruzione di tutte le possibili realizzazioni di un gruppo in termini di trasformazioni nello spazio delle osservabili fisiche. Ad esempio in meccanica classica si dovranno caratterizzare le realizzazioni di un gruppo in termini di trasformazioni canoniche, mentre in meccanica quantistica si realizza un gruppo in termini di trasformazioni unitarie nello spazio di Hilbert. In linea di massima la teoria dei gruppi, così intesa, fornisce gli strumenti matematici adatti per estrarre tutte le possibili conseguenze fisiche dalla presenza di una data simmetria. Illustriamo questo fatto con un semplice esempio. Consideriamo una molecola di ammoniaca in cui i tre atomi di idrogeno si dispongono in equilibrio sulla base di una piramide a base equilatera. Le piccole oscillazioni della molecola siano descritte dagli spostamenti rispetto alla posizione d'equilibrio dati da vettori $\mathbf{V} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{y})$. La simmetria della molecola è descritta dal gruppo $\mathfrak{G}_3$. Una qualunque trasformazione di simmetria si traduce in una trasformazione lineare su $\mathbf{V}$. Dato che la simmetria agisce nel piano degli atomi di idrogeno, possiamo semplificare la trattazione riducendoci a vettori nel piano e ignorando l'atomo di azoto. Potremo allora rappresentare ogni elemento di $\mathfrak{G}_3$ con una matrice a sei dimensioni. Si ha ad esempio per l'elemento $a \in \mathfrak{G}_3$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \mathbf{x}_3 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 0 & 0 & R_{2\pi/3} \\ R_{2\pi/3} & 0 & 0 \\ 0 & R_{2\pi/3} & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \mathbf{x}_3 \end{pmatrix}$$

dove $R_{2\pi/3}$ è la matrice 2×2 che rappresenta una rotazione di 120^0 nel piano. Analogamente la riflessione attorno all'altezza del triangolo cui appartiene il terzo atomo sarà rappresentata da una matrice

$$\sigma_3 \to \begin{pmatrix} 0 & S_3 & 0 \\ S_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

con

$$S_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Possiamo sinteticamente descrivere questa costruzione dicendo che esiste un *omomorfismo* dal gruppo $\mathfrak{G}_3$ nel gruppo $GL(6, R)$ delle matrici reali a sei dimensioni. In generale si definisce **rappresentazione lineare** di un gruppo $\mathfrak{G}$ un omomorfismo $\mathcal{D} : \mathfrak{G} \to \mathcal{B}(X)$ in un gruppo di *operatori lineari* in uno spazio lineare X; se n è la dimensione di X, la rappresentazione si dirà n–dimensionale.

Ovviamente ciò che viene espresso sinteticamente dal concetto di omomorfismo può essere presentato per esteso come segue: una *rappresentazione lineare reale (complessa)* del gruppo $\mathfrak{G}$ è data da un'applicazione $\mathcal{D} : \mathfrak{G} \to GL(N, R)(GL(N, C))$ di $\mathfrak{G}$ nel gruppo delle matrici reali (complesse) $N \times N$ che

soddisfi le seguenti condizioni:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(g)\mathcal{D}(g') &= \mathcal{D}(g \cdot g') \\ \mathcal{D}(e) &= 1_N \\ \mathcal{D}(g^{-1}) &= \mathcal{D}(g)^{-1} \end{aligned}$$

La rappresentazione è detta *fedele* se $\mathcal{D}(g) = \mathcal{D}(g')$ implica $g = g'$ ossia se $\mathcal{D}$ è un *isomorfismo*.

Di particolare interesse per le applicazioni in meccanica quantistica sono le **rappresentazioni unitarie**, per le quali l'omomorfismo $\mathcal{D}$ ha valori nel gruppo $U(N)$ delle matrici unitarie; in altri termini lo spazio in cui è realizzata la rappresentazione è dotato di un prodotto scalare invariante rispetto all'azione di $\mathcal{D}(\mathfrak{G})$. Delle rappresentazioni unitarie esiste una caratterizzazione completa, almeno per tutti i gruppi finiti e per una classe molto ampia di gruppi infiniti. Da un punto di vista molto generale la teoria unifica concetti provenienti dall'analisi, dalla geometria e dall'algebra (ad es. analisi di Fourier, la geometria degli spazi di Riemann, la teoria delle algebre di Lie). La teoria delle rappresentazioni lineari dei gruppi finiti, rilevanti per la trattazione di sistemi con simmetrie discrete, quali le molecole complesse, è un capitolo molto ricco di risultati della matematica moderna. Ci limitiamo ad accennare ad alcuni dei risultati più rilevanti, rimandando quindi per l'apprendimento della teoria al testo di [**Wig59, Ham62**]. Ogni rappresentazione unitaria si può decomporre in costituenti fondamentali detti **irriducibili**. Una rappresentazione è detta irriducibile se non esistono sottospazi invarianti sotto l'azione di $\mathfrak{G}$. In altri termini dato un qualunque vettore $|v\rangle$ nello spazio in cui agisce la rappresentazione, l'unico vettore ortogonale a tutti i vettori $\{\mathcal{D}(g)|0\rangle, g \in \mathfrak{G}\}$ risulta essere il vettore nullo. Due rappresentazioni irriducibili $\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2$ sono dette *equivalenti* se esiste una matrice unitaria U tale che per ogni $g \in \mathfrak{G}$ si abbia $\mathcal{D}_1(g)U = U\mathcal{D}_2(g)$. Ogni gruppo finito ammette soltanto un numero finito di rappresentazioni irriducibili, a meno di equivalenza. Questo numero è individuato a partire dalla struttura astratta del gruppo in base al concetto di *classi di coniugazione*: si dice che due elementi $g, g' \in \mathfrak{G}$ sono *coniugati* ($g \sim g'$) se esiste un terzo elemento h tale che $g \cdot h = h \cdot g'$. In base a questa relazione di equivalenza il gruppo risulta suddiviso in classi. Citiamo senza dimostrazione (vedi [**Ham62**]) il seguente teorema che costituisce la base dell'applicazione della teoria delle rappresentazioni:

Teorema B.1.1 []Il numero di classi coincide con il numero di rappresentazioni irriducibili inequivalenti.

Le proprietà basilari delle rappresentazioni irriducibili si riassumono nei lemmi di Schur:

Lemma di Schur 1 []Date due rappresentazioni irriducibili $\mathcal{D}_1$ e $\mathcal{D}_2$ di $\mathfrak{G}$, e un operatore lineare S tale che $\mathcal{D}_1 S = S\mathcal{D}_2$ si hanno solo due possibilità:

(i) $\mathcal{D}_1$ e $\mathcal{D}_2$ sono equivalenti ed S è invertibile, ovvero
(ii) S è l'operatore nullo.

Lemma di Schur 2 []Se la rappresentazione $\mathcal{D}$ di $\mathfrak{G}$ è irriducibile e l'operatore X commuta con tutti gli operatori $\mathcal{D}(g)$ allora X è un multiplo dell'operatore identità.

Date due rappresentazioni irriducibili inequivalenti $\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2$ e un qualunque operatore X consideriamo l'operatore lineare

$$Y_{12} = \sum_{g \in \mathfrak{G}} \mathcal{D}_1(g) X \mathcal{D}_2(g^{-1})$$

Si verifica facilmente che per ogni $g' \in \mathfrak{G}$ si trova

$$\mathcal{D}_1(g') Y_{12} = Y_{12} \mathcal{D}_2(g')$$

e perciò Y è nullo. Inoltre per una data rappresentazione $\mathcal{D}$ irriducibile l'analoga costruzione

$$Y = \sum_{g \in \mathfrak{G}} \mathcal{D}(g) X \mathcal{D}(g^{-1})$$

porta a un operatore Y che commuta con ogni $\mathcal{D}(g')$ e perciò $Y = \lambda \mathbf{1}$. Scegliamo per X un operatore di proiezione $|\psi_1\rangle\langle\psi_2|$; otteniamo così:

$$\sum_{g \in \mathfrak{G}} \mathcal{D}_\mu(g)\, |\psi_1\rangle\langle\psi_2|\, \mathcal{D}_\nu(g^{-1}) = \lambda\, \delta_{\mu\nu}\ .$$

La costante λ si determina poi agevolmente considerando il caso $\mu = \nu$ e prendendo la traccia di ambo i membri:

$$\mathrm{Tr} \sum_{g \in \mathfrak{G}} \mathcal{D}_\mu(g)\, |\psi_1\rangle\langle\psi_2|\, \mathcal{D}_\mu(g^{-1}) = \mathrm{Tr} \sum_{g \in \mathfrak{G}} |\psi_1\rangle\langle\psi_2| = d_{\mathfrak{G}}\, \langle\psi_2|\psi_1\rangle = \lambda \dim(\mathcal{D})$$

dove $d_{\mathfrak{G}}$ è l'ordine del gruppo e $\dim(\mathcal{D})$ è la dimensione della rappresentazione. Abbiamo così ricavato dai lemmi di Schur una proprietà fondamentale dell'insieme $\hat{\mathfrak{G}}$ di tutte le rappresentazioni unitarie irriducibili di $\mathfrak{G}$ (**relazioni di ortogonalità**):

$$\sum_{g \in \mathfrak{G}} \langle\psi_1|\mathcal{D}_\mu(g)|\psi_2\rangle\langle\psi_3|\mathcal{D}_\nu(g^{-1})|\psi_4\rangle = \frac{d_{\mathfrak{G}}}{\dim(\mathcal{D}_\mu)}\, \delta_{\mu\nu} \langle\psi_1|\psi_4\rangle\langle\psi_3|\psi_2\rangle\ . \tag{B.1}$$

Gli elementi di matrice delle rappresentazioni irriducibili riferite a basi ortonormali formano pertanto un insieme di vettori ortogonali nello spazio $\mathcal{L}_2(\mathfrak{G})$; quest'ultimo è uno spazio lineare a dimensione $d_{\mathfrak{G}}$ e perciò il numero totale di elementi di matrice non può superare $d_{\mathfrak{G}}$. Un argomento abbastanza complesso mostra che in realtà questo limite superiore è saturato e cioè

$$\sum_\mu \dim(\mathcal{D}_\mu)^2 = d_{\mathfrak{G}}$$

Le relazioni di ortogonalità permettono di sviluppare l'**analisi armonica** sui gruppi finiti in modo analogo a quella basata sulla trasformata di Fourier. In effetti quest'ultima, nella sua forma "discreta", altro non è che la analisi delle rappresentazioni unitarie del gruppo ciclico $\mathfrak{C}_N$. Se $f(g)$ è una funzione definita sul gruppo $\mathfrak{G}$, potremo scrivere

$$f(g) = \sum_\mu \sum_{ij} f^\mu_{ij}\, \mathcal{D}^\mu_{ij}(g)$$

che ammetterà la relazione inversa

$$f^{\mu}_{ij} = \frac{\dim(\mathcal{D}^{\mu})}{d_{\mathfrak{G}}} \sum_{g} f(g)\, \overline{\mathcal{D}^{\mu}_{ij}}(g)\ .$$

Per il gruppo ciclico (vedi Pag. 475) tutte le rappresentazioni sono mono-dimensionali e sono espresse da

$$\mathcal{D}^{k}(x) = \omega^{k}_{N}$$

essendo N l'ordine del gruppo e ω la radice primitiva dell'unità ($\exp\{2\pi i/N\}$).

Osserviamo che per un gruppo abeliano *tutte le rappresentazioni irriducibili sono mono-dimensionali*, come si deriva applicando il secondo lemma di Schur.

Per il gruppo del triangolo abbiamo tre classi di coniugazione (l'identità, le rotazioni e le riflessioni) e quindi tre rappresentazioni irriducibili inequivalenti: la rappresentazione banale $\mathcal{D}_1(g) = 1$ (che esiste sempre per ogni gruppo), la rappresentazione $\mathcal{D}_2$ che assegna 1 alle rotazioni e -1 alle riflessioni e la terza $\mathcal{D}_3$ che è bi-dimensionale (deve infatti essere $\sum_{\mu} n^2_{\mu} = 6$) e rappresenta l'azione del gruppo del triangolo equilatero nel piano x-y. Si vedano [**Ham62, BC72**] per la classificazione delle rappresentazioni dei gruppi finiti con applicazioni alla fisica atomica e molecolare.

B.1.3. Gruppi continui, algebre di Lie. Per molte applicazioni fisiche ha notevole interesse lo studio delle rappresentazioni dei **gruppi continui**, di cui sono esempi il gruppo delle rotazioni, il gruppo euclideo, il gruppo di Lorentz, i gruppi *unitari* $SU(N)$. Per un gruppo continuo ogni elemento è individuato da uno o più parametri reali $\alpha_1, \ldots, \alpha_r$ tra loro indipendenti. Ad esempio per il gruppo delle rotazioni ($SO(3)$) ogni elemento è individuato dalla direzione dell'asse di rotazione e dall'angolo di rotazione, in tutto tre parametri reali. Ovviamente esiste un'ampia libertà di scegliere altre parametrizzazioni (angoli di Eulero, parametri di Klein, ecc.); il fatto essenziale è che gli elementi del gruppo sono in corrispondenza biunivoca con i punti di una *varietà* e siamo liberi di parametrizzare i punti della varietà con ogni insieme di coordinate che sia conveniente. La dimensione della varietà si dice per estensione la *dimensione del gruppo.* In termini di una data parametrizzazione la legge di gruppo sarà espressa come segue

$$\boxed{g(\alpha)\, g(\alpha') = g(\alpha''),\ \ \alpha'' = \Phi(\alpha, \alpha')}$$

dove la funzione Φ dovrà soddisfare opportuni requisiti affinché siano rispettati gli assiomi di gruppo. Anziché procedere in via astratta, consideriamo un gruppo continuo $\mathfrak{G}$ realizzato come gruppo di trasformazioni di uno spazio con coordinate $x_{\mu}(\mu = 1, \ldots, n)$

$$g : x_{\mu} \to x'_{\mu} = f_{\mu}(x; \alpha)\ .$$

Fissiamo i parametri del gruppo in modo che l'identità corrisponda a $\alpha = (0, 0, \ldots, 0)$. Lo studio delle proprietà di $\mathfrak{G}$ e delle sue rappresentazioni si può iniziare dalla considerazione degli elementi *prossimi all'identità*, che corrispondono cioè a valori "piccoli" dei parametri e per quali si usa il termine "trasformazioni infinitesimali". Se si assume che le funzioni f_{μ} siano analitiche e ci si limita al loro

sviluppo di Taylor troncato agli ordini più bassi, si avrà[3]

$$x'_\mu = x_\mu + \frac{\partial f_\mu(x,0)}{\partial \alpha_k}\alpha_k + O(\alpha^2)\ .$$

Per una qualunque funzione analitica di x che si trasformi come uno scalare sotto il gruppo $\mathfrak{G}$ si avrà

$$\begin{aligned} F(x) \to F(x') &= F(x) + \frac{\partial F}{\partial x_\mu}\frac{\partial f_\mu(x,0)}{\partial \alpha_k}\alpha_k + O(\alpha^2) \\ &= F(x) + \alpha_k X_k(F) + O(\alpha^2) \end{aligned}$$

Gli operatori differenziali

$$X_k = \frac{\partial f_\mu(x,0)}{\partial \alpha_k}\frac{\partial}{\partial x_\mu}$$

si dicono costituire una base per l'*algebra di Lie* del gruppo[4]. La struttura di algebra di Lie è caratterizzata dalle seguenti proprietà:
a) l'algebra è uno spazio lineare;
b) per ogni coppia di elementi (X, Y) è definito il *commutatore* $[X, Y]$ che appartiene all'algebra;
c) è soddisfatta l'identità (di Jacobi)

$$[X,[Y,Z]] + [Y,[Z,X]] + [Z,[X,Y]] = 0$$

Data una base $\{X_k | k = 1 \dots r\}$ è sufficiente verificare che il commutatore di una qualunque coppia di operatori della base è esprimibile come combinazione lineare degli stessi:

$$[X_k, X_h] \equiv X_k X_h - X_h X_k = c^j_{kh} X_j \tag{B.2}$$

con opportune costanti c^j_{kh} che vengono chiamate *costanti di struttura* dell'algebra. Questa proprietà si può verificare a partire dalla struttura di gruppo riconoscendo che una trasformazione infinitesimale corrispondente a una scelta dei parametri tutti nulli tranne $\alpha_k = \varepsilon$ si può rappresentare nel modo seguente:

$$F(x) \to F(x') = \exp\{\varepsilon X_k\} F(x)$$

e dunque l'applicazione successiva di due distinte trasformazioni con parametri infinitesimali $\alpha_k = \varepsilon$ e $\alpha_h = \varepsilon$ sarà equivalente, per la formula di Baker-Hausdorff (vedi il §B.1.8) all'espressione

$$\begin{aligned} F(x'') &= \exp\{\varepsilon X_h\}\exp\{\varepsilon X_k\} F(x) \\ &= \exp\{\varepsilon(X_h + X_k) + \tfrac{1}{2}\varepsilon^2 [X_h, X_k] + O(\varepsilon^3)\} F(x) \end{aligned}$$

Ma la composizione di due elementi del gruppo prossimi all'identità deve dare un altro elemento prossimo all'identità, per cui il commutatore $[X_h, X_k]$ deve essere esprimibile come combinazione lineare degli operatori X_k.

[3] Per semplicità di notazione si intenderà applicata la convenzione di Einstein secondo cui bisogna sommare sugli indici ripetuti.

[4] Sophus Lie è il matematico che ha posto i fondamenti della teoria dei gruppi continui.

Vediamo un esempio che è trattato più diffusamente nel testo (vedi il §8.2). Il gruppo delle rotazioni nello spazio $\mathbb{R}^3$ è isomorfo al gruppo $SO(3)$ delle matrici ortogonali con determinante uno, ossia ogni rotazione è rappresentabile nella forma

$$x_\mu = R_{\mu\nu} x_\nu$$

con $RR^t = 1$ (R^t è la *trasposta* di R). Una trasformazione infinitesimale corrisponde perciò a una matrice del tipo $R = 1 + \varepsilon X$ e la condizione di ortogonalità, trascurando termini di ordine ε^2, ci dà $X + X^t = 0$, ossia X è *antisimmetrica*. Ogni matrice antisimmetrica è esprimibile come combinazione lineare delle tre matrici

$$X_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \; X_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \; X_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Per calcolo diretto si verifica facilmente che valgono le relazioni

$$[X_1, X_2] = X_3, \; [X_2, X_3] = X_1, \; [X_3, X_1] = X_2$$

che si esprimono sinteticamente con $[X_i, X_j] = \varepsilon_{ijk} X_k$. Le costanti di struttura del gruppo delle rotazioni sono pertanto esprimibili in termini del simbolo di Ricci ε_{ijk}.

Può risultare utile adottare un'altra parametrizzazione per le rotazioni, che ora descriviamo. Sia $\mathbf{n}$ il versore che individua l'asse di rotazione e sia α l'angolo di rotazione, con la convenzione che un angolo positivo corrisponde ad una rotazione antioraria nel piano ortogonale a $\mathbf{n}$. La rotazione si può allora esprimere in termini della componente $\mathbf{x}_\parallel$ parallela a $\mathbf{n}$ e della componente ortogonale $\mathbf{x}_\perp$, date ovviamente da $\mathbf{x}_\parallel = (\mathbf{n}\cdot\mathbf{x})\mathbf{n}$, $\mathbf{x}_\perp = \mathbf{x} - \mathbf{x}_\parallel$. Nel piano ortogonale a $\mathbf{n}$ una base è data da $\mathbf{x}_\perp$ e da $\mathbf{n}\wedge\mathbf{x}$, tranne che nel caso di vettori paralleli all'asse di rotazione, che però sono per definizione invarianti sotto la rotazione. Si avrà allora sotto una rotazione

$$\begin{aligned} \mathbf{x}'_\parallel &= \mathbf{x}_\parallel \\ \mathbf{x}'_\perp &= \cos\alpha\, \mathbf{x}_\perp + \sin\alpha\, \mathbf{n}\wedge\mathbf{x} \end{aligned}$$

da cui segue

$$\begin{aligned} \mathbf{x}' &= \mathbf{x}_\parallel + \cos\alpha\, \mathbf{x}_\perp + \sin\alpha\, \mathbf{n}\wedge\mathbf{x} \\ &= (\mathbf{n}\cdot\mathbf{x})\mathbf{n} + (\mathbf{x} - (\mathbf{n}\cdot\mathbf{x})\mathbf{n})\cos\alpha + \mathbf{n}\wedge\mathbf{x}\sin\alpha \\ &= \mathbf{x}\cos\alpha + \mathbf{n}\wedge\mathbf{x}\sin\alpha + (1-\cos\alpha)(\mathbf{n}\cdot\mathbf{x})\mathbf{n} \\ &\equiv R(\mathbf{n},\alpha)\,\mathbf{x} \end{aligned} \tag{B.3}$$

Per una trasformazione infinitesimale si ha perciò

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \alpha\mathbf{n}\wedge\mathbf{x} + O(\alpha^2)$$

e per l'azione su una generica funzione analitica $F(\mathbf{x})$ troviamo

$$F(\mathbf{x}') = F(\mathbf{x}) + \alpha\mathbf{n}\wedge\mathbf{x}\cdot\nabla F(\mathbf{x})$$

ossia gli operatori dell'algebra di Lie sono dati dalle componenti del vettore $\mathbf{X} = \mathbf{n} \wedge \nabla$, ossia

$$X_1 = x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_2},\ X_2 = x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_3},\ X_3 = x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1}$$

che soddisfano le medesime relazioni di commutazione trovate in precedenza.

PROBLEMA B.1-6 []Determinare l'algebra di Lie del gruppo euclideo nel piano, realizzato dalle trasformazioni

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

PROBLEMA B.1-7 []Determinare l'algebra di Lie del gruppo di Poincaré nel piano, realizzato dalle trasformazioni

$$\begin{pmatrix} x \\ t \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} \cosh\tau & \sinh\tau \\ -\sinh\tau & \cosh\tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ t \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

B.1.4. Gruppo delle rotazioni e gruppo $SU(2)$. Esiste una parametrizzazione del gruppo delle rotazioni che ha particolare rilevanza in meccanica quantistica (vedi il cap. 8). Si tratta di un omomorfismo di $SO(3)$ nel gruppo $SU(2)$ delle matrici unitarie 2×2 a determinante uno che permette di individuare una rotazione in termini di due parametri complessi [5]. L'omomorfismo si costruisce nel modo seguente. Si consideri la matrice

$$\mathcal{Z} = \begin{pmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{pmatrix}$$

che associa ad ogni vettore (x, y, z) una matrice hermitiana a traccia nulla. La trasformazione

$$\mathcal{Z} \to \mathcal{Z}' = u \mathcal{Z} u^\dagger$$

con $u u^\dagger = 1$ costituisce una trasformazione di similitudine che perciò lascia invariata la traccia e il determinante di $\mathcal{Z}$. La matrice hermitiana $\mathcal{Z}'$ deve pertanto essere della stessa forma di $\mathcal{Z}$ corrispondentemente ad un altro vettore (x', y', z') avente la stessa lunghezza di (x, y, z). Dato che la relazione $(x, y, z) \to (x', y', z')$ è lineare si tratta di una rotazione. Se introduciamo le tre **matrici di Pauli**

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{B.4}$$

potremo esprimere la relazione tra $\mathcal{Z}$ e $\mathcal{Z}'$ nel modo seguente

$$\mathcal{Z}' = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x}' = u\, \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x}\, u^\dagger$$

ovvero, indicando con $x'_\mu = R_{\mu\nu} x_\nu$ la rotazione, si può esprimere la matrice ortogonale R in termini di U, il che fornisce esplicitamente l'omomorfismo:

$$R_{\mu\nu} = \tfrac{1}{2} \mathrm{Tr}\, \sigma_\mu u \sigma_\nu u^\dagger\ .$$

[5] Più propriamente di un *quaternione* di modulo uno.

Per costruzione u e $ue^{i\varphi}$ corrispondono alla stessa rotazione, perciò possiamo imporre la condizione $\det(u) = 1$. Il gruppo di matrici così individuato è denominato $SU(2)$. L'omomorfismo $SU(2) \to O(3)$ è tale che ad ogni R corrispondono due matrici u e $-u$. In particolare per il sottogruppo delle rotazioni intorno all'asse z si ha

$$u = \begin{vmatrix} e^{i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi/2} \end{vmatrix} \longrightarrow R = \begin{vmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} .$$

In generale alla matrice $R(\mathbf{n}, \varphi)$ definita nell'Eq. (B.3), che descrive una rotazione di un angolo φ intorno al generico asse di direzione $\mathbf{n}$, corrisponde la matrice unitaria

$$u = \cos(\tfrac{1}{2}\varphi) - i\sin(\tfrac{1}{2}\varphi)\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} . \tag{B.5}$$

Si noti che mentre φ varia tra 0 e 2π il vettore in $\mathbb{R}^3$ compie un giro completo, mentre la matrice di $SU(2)$ varia tra l'unità e

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Dopo un secondo giro completo anche la matrice di $SU(2)$ torna all'identità. Non si conoscono grandezze fisiche in meccanica classica che si trasformino direttamente in termini di u. Come illustrato nel §8.2.2, in meccanica quantistica si è invece portati a considerare anche oggetti che sotto rotazioni si trasformano come

$$\psi \to \psi' = u\psi .$$

Tali oggetti sono denominati **spinori**.

PROBLEMA B.1-8 []Dimostrare l'isomorfismo del gruppo costituito da $(\pm\mathbf{1}, \pm i\sigma_1, \pm i\sigma_2, \pm i\sigma_3)$ con il gruppo dei quaternioni. Ciò implica che esiste una corrispondenza che associa ad ogni quaternione una rotazione spaziale (Hamilton 1863).

B.1.5. Rappresentazioni lineari. La teoria delle **rappresentazioni lineari** di gruppi continui si è sviluppata anche sotto lo stimolo delle applicazioni fisiche ed ha raggiunto ormai uno stadio semi-definitivo. Non possiamo in questa sede neppure dare un'introduzione elementare all'argomento, per cui rimandiamo ai testi già citati [**Ham62, Wig59, BC72, Žel73, Kir74, Vil69**]. Ci limitiamo a fornire un esempio abbastanza strutturato da essere rappresentativo del problema generale. Si consideri il gruppo $SU(2)$; un elemento generico sia individuato da

$$u = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{pmatrix}$$

con $\det(u) = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Siano z_1, z_2 due variabili complesse; il gruppo agisce naturalmente sulla coppia (z_1, z_2) e cioè

$$u\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha z_1 + \beta z_2 \\ -\bar{\beta} z_1 + \bar{\alpha} z_2 \end{pmatrix} .$$

L'insieme dei polinomi $\mathcal{P}^{(N)}$ omogenei di grado N costituisce uno spazio lineare complesso su cui il gruppo $SU(2)$ può essere fatto agire nel modo più semplice

$$p \in \mathcal{P}, D^{(N)}(u)\, p(z_1, z_2) := p(u^{-1}(z_1, z_2)) = p(\bar{\alpha} z_1 - \beta z_2, \bar{\beta} z_1 + \alpha z_2)\ .$$

È chiaro che l'azione di $D^{(N)}(u)$ trasforma un polinomio omogeneo in un altro polinomio omogeneo dello stesso grado e questa azione è *lineare*. Abbiamo dunque ottenuto una *rappresentazione lineare (N+1)-dimensionale* di $SU(2)$ in corrispondenza ad ogni intero N. Se siamo in grado di determinare un *prodotto scalare* in $\mathcal{P}$ che sia invariante sotto l'azione di $D(u)$ avremo costruito una serie di *rappresentazioni unitarie* di $SU(2)$, che risultano inoltre *irriducibili*. Per costruire il prodotto scalare possiamo osservare che un polinomio omogeneo di grado N si può sempre scrivere come

$$p(z_1, z_2) = z_2^N p(z_1/z_2, 1) \equiv z_2^N P(z)\ .$$

L'azione di $SU(2)$ può allora essere riferita ai polinomi $P(z)$ della singola variabile complessa z nel modo ovvio:

$$(D^{(N)}(u)\, P)(z) = (\bar{\beta} z + \alpha)^N\ P\left(\frac{\bar{\alpha} z - \beta}{\bar{\beta} z + \alpha}\right)\ . \tag{B.6}$$

Si verifica facilmente che il prodotto scalare

$$\langle P_1 | P_2 \rangle = \mathcal{N} \int \frac{dz\, d\bar{z}}{(1 + |z|^2)^{N+2}}\, \overline{P_1(z)}\ P_2(z)$$

risulta invariante sotto l'azione di $SU(2)$ e perciò la rappresentzione $D^{(N)}$ è unitaria.

PROBLEMA B.1-9 []Determinare la rappresentazione degli operatori dell'algebra di Lie di $SU(2)$ a partire dall'Eq. (B.6).

SOLUZIONE *[]Una base dell'algebra di Lie di* $SU(2)$ *si ottiene in corrispondenza a* $u_i = 1 + \varepsilon \sigma_i$*; sviluppando l'Eq.* (B.6) *al primo ordine in* ε *si ottiene:*

$$\begin{aligned}(D^{(N)}_{u_1} P)(z) &= (1 + \varepsilon z)^N P\left(\frac{z - \varepsilon}{1 + \varepsilon z}\right) \\ &= P(z) + \varepsilon\, (N z\, P(z) - (1 + z^2)\, P'(z)) + O(\varepsilon^2)\end{aligned}$$

da cui

$$X_1 \to \tfrac{1}{2} N z - \tfrac{1}{2}(1 + z^2) \frac{d}{dz}$$

e analogamente si trova

$$X_2 \to i \tfrac{1}{2} N z + i \tfrac{1}{2}(1 - z^2) \frac{d}{dz}$$
$$X_3 \to i N - i z \frac{d}{dz}$$

B.1.6. Analisi armonica su gruppi continui. L'analisi armonica sui gruppi finiti illustrata nel §B.1.2 si può estendere ai gruppi continui (e compatti). Il primo passo è costituito dalla introduzione di una misura di integrazione $d\mu(g)$ sulla varietà dei parametri del gruppo che sia invariante rispetto alla moltiplicazione del gruppo stesso (per i gruppi finiti questa proprietà consiste nell'attribuire lo stesso peso a ciascun elemento del gruppo, come nell'Eq. (B.1)). In termini di questa integrazione invariante è possibile stabilire una relazione di ortogonalità della forma

$$\begin{aligned}\int d\mu(g)\,\langle\psi_1|\mathcal{D}^{(\lambda)}(g)|\psi_2\rangle\langle\psi_3|\mathcal{D}^{(\nu)}(g^{-1})|\psi_4\rangle \\ = \frac{V_{\mathfrak{G}}}{\dim(\mathcal{D}^{(\lambda)})}\,\delta_{\lambda\nu}\langle\psi_1|\psi_4\rangle\langle\psi_3|\psi_2\rangle\end{aligned} \tag{B.7}$$

dove λ, ν sono indici generalizzati che individuano le varie rappresentazioni unitarie irriducibili e $V_{\mathfrak{G}}$ è il volume del gruppo. Si vedano [**Ham62, Wig59, Vil69, Žel73**] per una trattazione completa.

B.1.7. Integrazione invariante su $SU(2)$. Qui ci limiteremo a costruire esplicitamente, anche se in modo euristico, la misura invariante per $SU(2)$. Consideriamo dunque un generico elemento di $SU(2)$ nella parametrizzazione già adottata al §B.1.4:

$$u = \cos\frac{\alpha}{2} - i\sin\frac{\alpha}{2}\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \exp(-i\boldsymbol{\lambda}\cdot\sigma/2)\ . \tag{B.8}$$

Osserviamo che $\alpha = |\boldsymbol{\lambda}|$ rappresenta l'angolo di rotazione attorno all'asse $\mathbf{n} = \boldsymbol{\lambda}/|\boldsymbol{\lambda}|$ e che, trattandosi di $SU(2)$, α varia da 0 a 2π se $\mathbf{n}$ varia sull'intera sfera S^2. I parametri $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ corrispondono a spostamenti che sono intuitivamente ortogonali (rotazioni attorno ai tre assi coordinati). Inoltre, poiché rotazioni dello stesso angolo attorno a due assi diversi sono tra loro coniugate, tali spostamenti devono essere "pesati" nello stesso modo da una integrazione invariante. Matematicamente quanto appena detto si concretizza introducendo un prodotto scalare tra gli elementi dell'algebra di Lie:

$$(X, Y) = -2\mathrm{Tr}\,XY\ , \quad X = -\frac{i}{2}X_\mu\sigma_\mu\ , \quad Y = -\frac{i}{2}Y_\mu\sigma_\mu$$

che è invariante sotto trasformazioni aggiunte

$$(X, Y) = (u^{-1}Xu, u^{-1}u^{-1}Xu)$$

e rispetto al quale i generatori delle rotazioni attorno agli assi coordinati sono ortonormali

$$(-\tfrac{i}{2}\sigma_\mu, -\tfrac{i}{2}\sigma_\nu) = \delta_{\mu\nu}\ . \tag{B.9}$$

In base a questa proprietà le variabili λ_1, λ_2, λ_3 vengono denominate *coordinate normali*. La relazione (B.9) definisce evidentemente la metrica euclidea $ds^2 = d\lambda_\mu d\lambda_\mu$ nell'intorno dell'identità, cioè per matrici della forma $1 - i\boldsymbol{\lambda}\cdot\boldsymbol{\sigma}/2$ con $|\boldsymbol{\lambda}|$ infinitesimo. Nell'intorno del generico punto u, descritto dalle matrici della forma $u\cdot(1 - i\boldsymbol{\lambda}'\cdot\boldsymbol{\sigma}/2)$, la metrica invariante varrà ancora $ds^2 = d\lambda'_\mu d\lambda'_\mu$, per via della omogeneità del gruppo. Il problema è di determinare la relazione tra le coordinate normali λ'_μ attorno a u e quelle attorno all'identità, nelle quali

$u = \exp(-i\boldsymbol{\lambda}\cdot\boldsymbol{\sigma}/2)$. In altre parole dobbiamo riportare la matrice infinitesima du, che descrive l'intorno di u, nell'algebra di Lie che descrive l'intorno dell'identità. Dato che $u^{-1}u = 1$, l'oggetto che cerchiamo è la matrice $u^{-1}du$, esprimibile in base all'Eq. B.5 in termini dei parametri $(\alpha, \mathbf{n})$. Si trova così

$$\begin{aligned}\omega_\mu(\boldsymbol{\lambda}) &= \left(\tfrac{i}{2}\sigma_\mu, u^{-1}du\right)\\ &= -\mathrm{Tr}\left[\sigma_\mu\, u(-\boldsymbol{\lambda})\,\frac{\partial u(\boldsymbol{\lambda})}{\partial\lambda_\nu}\right] d\lambda_\nu\end{aligned}$$

e perciò

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{n}\, d\alpha + 2\sin\frac{\alpha}{2}\left[\cos\frac{\alpha}{2}\, d\mathbf{n} - \sin\frac{\alpha}{2}\, \mathbf{n}\wedge d\mathbf{n}\right].$$

Tenendo conto del fatto che $\mathbf{n}\cdot d\mathbf{n} = 0$, si calcola facilmente la metrica

$$\begin{aligned}ds^2 &= \omega_\mu\omega_\mu = (iu^{-1}du, iu^{-1}du)\\ &= d\alpha^2 + 4\sin^2\frac{\alpha}{2}\, d\mathbf{n}\cdot d\mathbf{n}\,,\end{aligned} \tag{B.10}$$

dove $d\mathbf{n}\cdot d\mathbf{n}$ è la metrica $SO(3)$–invariante della sfera S^2; ad esempio:

$$d\mathbf{n}\cdot d\mathbf{n} = d\vartheta^2 + \sin^2\vartheta\, d\varphi^2$$

nella parametrizzazione $\mathbf{n} = (\sin\vartheta\cos\varphi, \sin\vartheta\sin\varphi, \cos\vartheta)$ in termini egli angoli sferici.

Possiamo ora verificare che la metrica dell'Eq. (B.10) si riduce effettivamente a quella euclidea $ds^2 = d\lambda_\mu d\lambda_\mu$ nell'intorno dell'identità ($\alpha \to 0$) ed che è bi-invariante, cioè invariante per moltiplicazioni di u sia a sinistra, $u \to au$, che a destra, $u \to ub$, per arbitrari, ma fissati $a, b \in SU(2)$. L'invarianza a sinistra segue da

$$(au)^{-1}d(au) = u^{-1}a^{-1}a\, du = u^{-1}\, du$$

mentre quella a destra segue da

$$\begin{aligned}(ua)^{-1}d(au) &= a^{-1}(u^{-1}du)a\\ &= -i\omega_\mu a^{-1}\sigma_\mu a = -i\omega_\mu R_{\mu\nu}(a)\,\sigma_\nu\end{aligned}$$

e dal fatto che le matrici $R \in SO(3)$ della rappresentazione aggiunta lasciano invariato il tensore $\delta_{\mu\nu}$.

Il risultato dell'Eq. (B.10) ci permette ora di scrivere la misura bi-invariante su $SU(2)$, vale a dire

$$d\mu(u) = 4\,\sin^2\frac{\alpha}{2}\,\sin\vartheta\; d\alpha\, d\vartheta\, d\varphi\,,$$

valida nella parametrizzazione $u = \exp\{-i\alpha\mathbf{n}(\vartheta,\varphi)\cdot\sigma/2\}$. In particolare, possiamo calcolare il volume di $SU(2)$:

$$\int d\mu(u) = 8\pi^2\,.$$

B.1.8. Formula di Baker-Hausdorff. L'applicazione esponenziale $\exp : \mathcal{U} \in \mathfrak{g} \to \mathfrak{G}$ associa ad ogni elemento dell'algebra di Lie $\mathfrak{g}$ appartenente ad un opportuno intorno dell'elemento nullo un elemento del gruppo di Lie $\mathfrak{G}$. Per le rappresentazioni lineari l'applicazione si può definire attraverso lo sviluppo di Taylor caratterizzato dagli stessi coefficienti della funzione esponenziale in campo complesso. Le proprietà dell'applicazione

$$U = \exp\{X\}$$

nel caso delle algebre di Lie non commutative si discostano da quelle con cui siamo familiari dall'analisi matematica. Discuteremo tre formule di analisi non commutativa che sono di uso abbastanza comune. La proprietà $\exp(x+y) = \exp(x)\exp(y)$ viene trasformata nella seguente, detta formula di Baker-Hausdorff: [**Rot92, NS79**]

$$\exp(x)\exp(y) = \exp(x + y + c(x,y)) \tag{B.11}$$

dove il termine $c(x,y)$ è esprimibile ricorsivamente secondo lo schema:

$$c(x,y) = \sum_{n=2}^{\infty} c_n(x,y)$$

$$(n+1)\, c_{n+1}(x,y) = \tfrac{1}{2}[x-y, c_n(x,y)] +$$

$$\sum_{1\le p\le \frac{1}{2}n} \frac{B_{2p}}{(2p)!} \sum_{m_1+\ldots+m_{2p}=n} [c_{m_1}, [c_{m_2}, \ldots [c_{m_{2p}}, c_1]\ldots]]$$

$$c_1(x,y) \equiv x + y$$

La seconda sommatoria si estende a tutte le partizioni di p in un numero pari di interi; ciò comporta che il numero di termini coinvolti in c_n cresce molto rapidamente con l'ordine che si intende raggiungere. Nella pratica è talora sufficiente limitarsi ai primi termini che sono dati esplicitamente da

$$\begin{aligned}\exp(x)\exp(y) \sim \exp\big\{x + y + \tfrac{1}{2}[x,y] + \\ \tfrac{1}{12}[x,[x,y]] + \tfrac{1}{12}[y,[y,x]] + \\ - \tfrac{1}{24}[x,[y,[x,y]]] + \ldots\big\}\end{aligned}$$

In particolare nel caso di operatori canonici per i quali il commutatore è multiplo dell'identità la serie di Baker-Hausdorff si tronca esattamente al primo termine:

$$[a, a^\dagger] = 1 \to \exp(\alpha a)\exp(\beta a^\dagger) = \exp\left(\alpha a + \beta a^\dagger + \tfrac{1}{2}\alpha\beta\right) .$$

Per ulteriori sviluppi su questo tema si vedano [**Mag54, WM62, NT87**].

Esiste una particolare forma dello sviluppo di Baker-Hausdorff che si può prestare a qualche applicazione:

Teorema B.1.2 []Sia $\mathfrak{g}$ un'algebra di Lie. Per λ e μ in un intorno dello zero si ha

$$\log(e^\lambda e^\mu) = \lambda + \int_0^1 \Psi\left(e^{Ad(\lambda)}\, e^{t\,Ad(\mu)}\right)\, \mu\, dt$$

dove $\Psi(z) \equiv (z\log(z))/(z-1)$ è definita dalla sua determinazione principale intorno a $z = 1$ e il simbolo Ad è definito dal commutatore: $Ad(\lambda)\,\mu \equiv [\lambda, \mu]$.

Si veda [**HS64**] per la dimostrazione. Un'altra formula che assume importanza fondamentale nella formulazione *alla Feynman* della meccanica quantistica è quella di **Lie-Trotter**:

$$\exp(x+y) = \lim_{n\to\infty} \left(\exp(x/n)\exp(y/n)\right)^n \ .$$

Questa formula è conveniente nel caso si sia in grado di esprimere in forma chiusa separatamente $\exp(x)$ e $\exp(y)$ ma non $\exp(x+y)$. Il procedimento di limite va inteso in una opportuna norma. Per gli aspetti di analisi funzionale connessi a questa formula si veda [**RS78b, Ono09**].

Altre formule di analisi non-commutativa di uso frequente sono:

a) Formula di coniugazione (azione "aggiunta" del gruppo sull'algebra di Lie):

$$\exp(x)\, y\, \exp(-x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(x,y) \tag{B.12}$$

dove i termini dello sviluppo soddisfano la relazione di ricorrenza

$$(n+1)A_{n+1}(x,y) = [x, A_n(x,y)]$$

con $A_0(x,y) = y$. È immediato ottenere i primi termini nella forma

$$\exp(x) y \exp(-x) = y + [x,y] + \tfrac{1}{2}[x,[x,y]] + \dots \ .$$

b) Formula di differenziazione dell'esponenziale

$$\frac{d}{dt}\exp(X+tY)|_{t=0} = \int_0^1 ds \exp((1-s)X) Y \exp(sX) \ .$$

c) *Rappresentazione di interazione* (che trova applicazione in teoria delle perturbazioni)

$$\exp(X+\lambda Y) = \exp(X)\, \mathbb{T}\exp\left\{\lambda \int_0^1 ds e^{-sX} Y e^{sX}\right\} \ .$$

Quest'ultima formula coinvolge il simbolo di *esponenziale cronologicamente ordinato* definito nel §10.1.4.

B.2. Metodi asintotici

Una serie di potenze *divergente* per ogni valore della variabile complessa z

$$a_0 + a_1 z^{-1} + a_2 z^{-2} + \cdots + a_n z^{-n} + \cdots \tag{B.1}$$

può, sotto opportune condizioni, costituire un utile strumento di approssimazione. Si dice (vedi [**WW69**]) che la funzione analitica $f(z)$ è rappresentata dalla **serie asintotica** (B.1) nel settore $(\vartheta_1 < \arg z < \vartheta_2)$ se per ogni intero N si ha

$$\lim_{\substack{|z|\to\infty \\ \vartheta_1<\arg z<\vartheta_2}} \left| f(z) - \sum_{n=0}^{N} a_n z^{-n} \right| \left|z^{N+1}\right| = a_{N+1} \ . \tag{B.2}$$

In questa circostanza si adotta la notazione $f(z) \sim \sum a_n z^{-n}$. Si ha dunque che $f(z) = \sum_{n=0}^{N} a_n z^{-n} + R_N(z)$, ma a differenza del caso di una serie convergente (di Laurent) in cui $R_N \to 0$ per $N \to \infty$, si ha invece una convergenza per $|z| \to \infty$ **a N fissato**. Un esempio elementare (dovuto ad Eulero) nel campo reale è il seguente: sia $f(z)$ definita attraverso una rappresentazione integrale (come è il

caso quando si tratta della soluzione di un'equazione differenziale con il *metodo di Laplace*)

$$\begin{aligned}
f(x) &= \int_x^\infty \frac{dt}{t} e^{x-t} \\
\text{(integrando per parti)} &= \frac{1}{x} - \int_x^\infty \frac{dt}{t^2} e^{x-t} \\
&= \frac{1}{x} - \frac{1}{x^2} + 2\int_x^\infty \frac{dt}{t^3} e^{x-t} \\
&= \frac{1}{x} - \frac{1}{x^2} + \frac{2}{x^3} - 6\int_x^\infty \frac{dt}{t^4} e^{x-t} \\
&= \sum_{n=0}^{N} \frac{(-)^n n!}{x^{n+1}} + R_{N+1}(x)\ .
\end{aligned}$$

Si vede che la serie $\sum(-)^n n!/x^n$ diverge per ogni valore di x, e però tenendo N fisso il resto tende a zero per grandi valori di x:

$$\begin{aligned}
|R_N(x)| &\equiv N! \int_x^\infty \frac{dt}{t^{n+1}}\, e^{x-t} \\
&< \frac{N!}{x^{N+1}} \int_x^\infty dt\, e^{x-t} \equiv \frac{N!}{x^{N+1}}\ .
\end{aligned}$$

Notiamo che in questo esempio esiste un N *ottimale* a cui conviene arrestare la somma per minimizzare il resto ad un dato valore di x. Dalla formula di Stirling si ottiene infatti $R_N \le N^N e^{-N}\sqrt{2\pi N}/x^{N+1}$ e la derivata logaritmica fatta rispetto al parametro N considerato come un numero reale ci dà per il minimo di R_N l'espressione

$$\frac{\partial \log R_N}{\partial N} = 0 \Longrightarrow -\log x + \log N + \frac{1}{2N} = 0$$

da cui si conclude che conviene troncare la serie a $N = \tilde{N} \sim x$ e a questo valore il resto vale $R_{\tilde{N}} \sim e^{-x}\sqrt{2\pi/x}$. *Esiste pertanto un limite finito, dipendente da x, alla precisione con cui una serie asintotica può approssimare una funzione assegnata.*

Un secondo inconveniente delle serie asintotiche è che non esiste, in generale, un criterio di *unicità*: da $f_1(z) \sim \sum a_n z^{-n}$ e $f_2(z) \sim \sum a_n z^{-n}$ possiamo solo dedurre che $f_1 - f_2$ decresce più velocemente di ogni potenza ma non certo $f_1 \equiv f_2$ come discenderebbe invece da uno sviluppo in serie convergente; è ovvio infatti che ad esempio $f(z)$ e $f(z) + \exp(-z)$ hanno lo stesso sviluppo asintotico per $\mathfrak{Re}\, z > 0$.

Un concetto più restrittivo di serie asintotica è il seguente:

Definizione B.2.1 *[]*Si dice che $f(z)$ è approssimata asintoticamente in senso forte dalla serie $\sum a_n z^{-n}$ se vale per ogni N una disuguaglianza

$$\left| f(z) - \sum_{n=0}^{N} a_n z^{-n} \right|_{\substack{|\arg z| < \frac{1}{2}\pi + \delta \\ |z| > \rho}} \le C\Gamma^{N+1}(N+1)!|z|^{-N-1}$$

per qualche scelta di costanti positive C, Γ, δ, ρ.

L'interesse per questa definizione più restrittiva consiste nel fatto che vale il principio di unicità: l'unica funzione fortemente asintotica alla serie nulla ($a_n \equiv 0$) è la funzione nulla (si veda [**RS78a**]).

Da un punto di vista pratico è importante avere a disposizione vari metodi per ottenere sviluppi asintotici. Si troveranno utili suggerimenti su [**Erd56, Din73, Evg61**]. Ci limiteremo qui ad alcuni metodi elementari, il *metodo di Laplace* e quello della *fase stazionaria*, casi speciali del cosiddetto metodo del punto sella ([**BRS93**], § 3.7).

B.2.1. Il metodo di Laplace. Il metodo di Laplace si applica a funzioni rappresentate da integrali della forma

$$f(x) = \int_a^b e^{xh(t)} G(t)\, dt$$

dove h e G sono funzioni continue e differenziabili. Per semplicità assumiamo addirittura che h e G siano analitiche in tutto un intorno dell'intervallo (a, b). Se $h(t)$ è monotona crescente (o decrescente) in (a, b) con $|h'(t)| > c > 0$, è sufficiente porre $h(t) = \tau$ per ottenere

$$\begin{aligned} f(x) &= \int_{h(a)}^{h(b)} e^{x\tau} G(h^{-1}(\tau)) \frac{dt(\tau)}{d\tau}\, d\tau \\ &= \int_{\tau_1}^{\tau_2} e^{x\tau} \sum_0^\infty a_n \tau^n\, d\tau \\ &= \frac{1}{x} e^{x\tau} \sum a_n \tau^n |_{\tau_1}^{\tau_2} - \frac{1}{x} \int_{\tau_1}^{\tau_2} e^{x\tau} \sum n a_n \tau^n\, d\tau \end{aligned}$$

e pertanto, integrando successivamente per parti, si ottiene lo sviluppo completo; nel caso di intervallo infinito si utilizza il

Teorema di Watson []Sia $f(z)$ analitica regolare, ad eccezione di un eventuale taglio con punto di diramazione in $z = 0$, in tutto il cerchio $|z| < a + \delta$ e valga lo sviluppo convergente

$$f(z) = \sum_{m=1}^\infty a_m z^{m/r-1}, \ |z| < a$$

con r positivo. Si assuma inoltre che per x reale positivo e $x > a$ valga la maggiorazione

$$|f(x)| < Ke^{bx}$$

con K e b positivi. Allora vale lo sviluppo asintotico

$$F(z) = \int_0^\infty f(x) e^{-zx}\, dx \sim \sum_1^\infty a_m\, \Gamma(m/r) z^{-m/r}\ . \tag{B.3}$$

Per la dimostrazione si veda [**Cop35**], § 9.52.

Il caso più interessante di applicazione del metodo di Laplace è invece quello in cui $h(t)$ raggiunge un massimo all'interno di $(a \dots b)$ con $h'(t) = 0$, $h''(t_0) < 0$. In questo caso si pone

$$h(t) = h(t_0) + \tfrac{1}{2} h''(t_0) \tau^2$$

relazione che deve essere invertita per ottenere $t = \psi(\tau) = \tau + O(\tau^2)$. L'integrale diventa

$$f(x) = \int_{\tau_1}^{\tau_2} e^{h(t_0)x + \frac{1}{2}h''(t_0)x\tau^2}\, G(\psi(\tau))\,\psi'(\tau)\,dt$$

dove

$$\tau_1 = -\sqrt{[h(a) - h(t_0)]/\tfrac{1}{2}h''(t_0)},\ \ \tau_2 = +\sqrt{[h(b) - h(t_0)]/\tfrac{1}{2}h''(t_0)}\,.$$

Per $x \to \infty$ la gaussiana $\exp(\frac{1}{2}h''(t_0)\,x\,\tau^2)$ è concentrata intorno a zero e l'integrale si può estendere a tutto l'asse reale compiendo un errore più piccolo di qualunque potenza negativa di x. Posto $|h''(t_0)| \equiv \sigma^{-1}$ si trova così :

$$\begin{aligned} f(x) &\sim \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}x\tau^2/\sigma}\, G(\psi(\tau))\,\psi'(t)\,dt\, e^{h(t_0)x} \\ &= e^{xh(t_0)}\, G(t_0)\sqrt{\frac{2\pi\sigma}{x}}\,\left(1 + O\left(x^{-1}\right)\right)\,. \end{aligned}$$

Se si dispone dello sviluppo in serie per la funzione $G(\psi(\tau))\psi'(\tau) = \sum_0^\infty a_n\tau^n$, si potrà derivare lo sviluppo completo

$$f(x) \sim e^{xh(\tau_0)}\sqrt{\frac{2\pi\sigma}{x}}\sum a_{2n}\,\frac{(2n)!}{2^n n!}\,\sigma^n/x^n$$

avendo applicato la formula di integrazione gaussiana (B.1). Un esempio in cui questo schema funziona in modo semplice è fornito dalla funzione di Bessel: $I_0(x) = \int_{-\pi}^{\pi} e^{x\cos\vartheta}d\vartheta$. Si ha in questo caso $h = \cos\vartheta$ e $G \equiv 1$. Il massimo di h è in $\vartheta = 0$, $\sigma = 1$ e pertanto

$$\cos\vartheta = 1 - \tfrac{1}{2}\tau^2 \Longrightarrow \tau = 2\sin\frac{\vartheta}{2}$$

$$\vartheta = 2\sin^{-1}\frac{\tau}{2} \Longrightarrow \frac{d\vartheta}{d\tau} = \frac{1}{\sqrt{1-\tau^2/4}} = \sum_0^\infty \binom{-\frac{1}{2}}{k}\left(-\frac{\tau^2}{4}\right)^k$$

$$I_0(x) \simeq e^x\sqrt{\frac{2\pi}{x}}\sum_0^\infty \frac{(2k)!(-)^k}{8^k k!}\binom{-\frac{1}{2}}{k}x^{-k} = e^x\sqrt{\frac{2\pi}{x}}\left(1 + \frac{1}{8x} + \dots\right)\,.$$

B.2.2. La formula di Stirling. Si vuole determinare lo sviluppo asintotico della funzione Γ di Eulero (vedi il §B.2.7).

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty e^{-t}t^{x-1}\,dt,\ (\Gamma(n+1) = n!)\,. \tag{B.4}$$

Con un occhio alla soluzione, consideriamo il rapporto

$$\frac{\Gamma(x)}{x^x} = \int_0^\infty e^{-t}\left(\frac{t}{x}\right)^x\frac{dt}{t} = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{x(\tau - e^\tau)}d\tau$$

avendo posto $t = xe^\tau$. Segue

$$\begin{aligned} &h(\tau) = \tau - e^\tau \Longrightarrow h'(0) = 0,\ h''(0) = -1 \\ &\tau - e^\tau = -1 - \tfrac{1}{2}\xi^2 \\ &\frac{\Gamma(x)}{x^x} \approx e^{-x}\int e^{-\frac{1}{2}x\xi^2}\left(\frac{d\tau}{d\xi}\right)d\xi\,. \end{aligned}$$

La funzione $\xi(\tau)$ si può invertire con il metodo di Burmann-Lagrange (vedi Probl. B.2-10); si può tuttavia procedere con un altro metodo di più generale applicabilità. Dato che $\tau = \xi + O(\xi^2)$ in prima approssimazione otteniamo immediatamente

$$\Gamma(x) \sim x^x e^{-x} \int e^{-\frac{1}{2}x\xi^2}\, d\xi = x^x e^{-x}\sqrt{\frac{2\pi}{x}}$$

che equivale a $n! \sim n^n e^{-n}\sqrt{2\pi n}$. Per ottenere lo sviluppo completo si sviluppa in serie $\exp(\tau)$ e si ottiene

$$e^x \frac{\Gamma(x)}{x^x} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \exp\left\{-\frac{1}{2!}x\tau^2 - \frac{1}{3!}x\tau^3 - \cdots - \frac{1}{n!}x\tau^n - \dots\right\} .$$

Sia $\tau = \xi/\sqrt{x}$,allora

$$\frac{\Gamma(x)}{x^x}e^x = \sqrt{\frac{2\pi}{x}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \exp\left\{(-\frac{\xi^3}{3!\sqrt{x}} - \cdots - \frac{\xi^n}{n! x^{n/2-1} - \dots})\right\} .$$

Si sviluppano a questo punto tutti gli esponenziali e si ottiene:

$$\sqrt{\frac{x}{2\pi}}\frac{\Gamma(x)e^x}{x^x} = \int \frac{d\xi}{\sqrt{2\pi}} e^{-\xi^2/2} \prod_{n=1}^{\infty} \sum_{m_n=0}^{\infty} (\frac{-\xi^{n+2}}{(n+2)! x^{n/2}})^{m_n}/m_n! =$$

$$= \sum_{m_1, m_2, \dots} x^{-\sum(\frac{n}{2})m_n} \frac{\left\langle \xi^{\sum(n+2)m_n}\right\rangle (-)^{\sum m_n}}{\prod_3^\infty m_n!((n+2)!)^{m_n}}$$

dove $\left\langle \dots \right\rangle$ indica la media sulla distribuzione normale (vedi (B.2)), per cui segue

$$\sqrt{\frac{x}{2\pi}}\frac{\Gamma(x)e^x}{x^x} \sim \sum_{N=0}^{\infty} x^{-N}$$

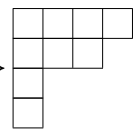
$$\sum_{\substack{m_1, m_2, \dots \\ \sum_{n>0} n\, m_n = 2N}} \frac{(-1)^{\sum m_n}[2(N + \sum m_n)]!}{2^{N+\sum m_n}(N + \sum m_n)!\ \prod_{n=1}^{\infty} m_n!\,(n+2)!^{m_n}} .$$

Per ogni N fissato contribuiscono i valori di $m_1, \dots, m_n, \dots$ che costituiscono una **partizione** di $2N$. Ad esempio le partizioni di 4 sono date da:

$1+1+1+1$	(1^4)	$\longleftrightarrow$	$m_1 = 4$
$2+1+1$	$(1^2, 2)$	$\longleftrightarrow$	$m_1 = 2, m_2 = 1$
$2+2$	(2^2)	$\longleftrightarrow$	$m_2 = 2$
$3+1$	$(1, 3)$	$\longleftrightarrow$	$m_1 = m_3 = 1$
4	(4)	$\longleftrightarrow$	$m_4 = 1$

Questa è la notazione standard per le partizioni e ad essa viene associato un grafico, detto **diagramma di Young**, che rappresenta la partizione in modo grafico con una matrice di celle, ogni riga contenente un numero pari ad un intero della decomposizione, ad esempio:

$$1^2 3^1 4^1 \Longleftrightarrow \begin{matrix} 4 \\ 3 \\ 1 \\ 1 \end{matrix} \Longrightarrow$$



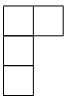
All'ordine $1/x$ contribuiscono le partizioni di $N = 2$

$$\longrightarrow (1^2) \longrightarrow m_1 = 2 \Rightarrow \frac{5}{24}$$

$$\longrightarrow (2) \longrightarrow m_2 = 1 \Rightarrow -\frac{1}{8}$$

per un totale di $\frac{1}{12}$. All'ordine $1/x^2$ $(2N = 4)$ contribuiscono:

$$m_1 = 4 \qquad \longrightarrow \qquad \frac{+12!}{6!2^6 4!3!^4} = 385/1152$$



$$m_1 = 2, m_2 = 1 \qquad \longrightarrow \qquad \frac{-10!}{5!2^5 2!3!^2 4!} = -35/64$$

$$m_2 = 2 \qquad \longrightarrow \qquad \frac{+8!}{2^4 4!4!^2 2!} = 35/384$$

$$m_1 = m_3 = 1 \qquad \longrightarrow \qquad \frac{+8!}{2^4 4!3!5!} = 7/48$$

$$m_4 = 1 \qquad \longrightarrow \qquad \frac{-6!}{3!2^3 6!} = -1/48$$

per un totale di $\frac{1}{288}$.

PROBLEMA B.2-10 [] Si inverta la relazione

$$\xi = \sqrt{2(e^\tau - 1 - \tau)}$$

facendo uso della formula di Burmann-Lagrange [**WW69**]

$$\tau = \sum k_n \xi^n, \; k_n \equiv \frac{1}{n!}\left(\frac{d}{d\tau}\right)^{n-1}\left(\frac{\tau^n}{\xi^n}\right)\Bigg|_{\tau=0}.$$

La serie che si ottiene può essere immediatamente utilizzata per ottenere lo sviluppo di Stirling (ad esempio si ottiene agevolmente il termine successivo $-139/51840x^{-3}$: per questo si suggerisce di utilizzare un programma di elaborazione simbolica; in *Mathematica*[6] ad esempio è sufficiente definire

```
f[z_] := z/Sqrt[2*(Exp[z]-1-z)];
k[n_] := Limit[1/n!*D[f[z]^n,{z,n-1}],z->0];
```

per ottenere rapidamente tutti i coefficienti desiderati. I più pigri possono poi evitare anche la formula di Lagrange ed usare direttamente `InverseSeries`.)

[6] ©Wolfram Research [**Wol92**]

B.2.3. Principio della fase stazionaria. Un'altro caso in cui è possibile sviluppare in serie asintotiche una funzione definita attraverso una rappresentazione integrale è il seguente

$$f(x) = \int_a^b e^{ixh(t)} g(t)\, dt\,.$$

Sia $h'(t_0) = 0$ per t_0 interno ad (a, b) e $h''(t_0) \neq 0$. Allora si pone

$$h(t) = h(t_0) + \tfrac{1}{2} h''(t_0)\tau^2 \Longrightarrow t = \psi(\tau)$$

$$f(x) \sim \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{ ih(t_0)x + \frac{i}{2} h''(t_0)\tau^2 \right\} g(\psi(\tau))\, \psi'(\tau)\, d\tau$$

$$= e^{ih(t_0)x}\, g(t_0) \sqrt{\frac{2\pi}{-xh''(t_0)}}\, e^{-\pi i/4} \left(1 + O(x^{-1})\right)\,.$$

La giustificazione dell'estensione dell'intervallo di integrazione a tutto l'asse reale è qui più sottile che nel caso di Laplace, in quanto abbiamo a che fare con una funzione $\exp\{i\alpha\tau^2\}$ che non tende a zero per $\tau \to \infty$. Il punto è che il contributo fornito all'integrale dai valori di τ molto grandi è trascurabile per via della "interferenza distruttiva" dei fattori di fase (vedi [**Tor53**]). Come caso particolare otteniamo

$$\int e^{it^2/2\varepsilon} g(t)\, dt \sim g(0)\sqrt{2\pi i\varepsilon}$$

ossia

$$\frac{e^{it^2/2\varepsilon}}{\sqrt{2\pi i\varepsilon}} \xrightarrow{\varepsilon \sim 0} \delta(t)\,.$$

PROBLEMA B.2-11 []La funzione di Bessel $J_n(x)$ è definita dall'integrale

$$J_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{ix\sin\vartheta - ni\vartheta} d\vartheta\,. \tag{B.5}$$

Determinare lo sviluppo asintotico

$$J_n(x) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - n\pi/2 - \pi/4\right) + O(x^{-3/2})\,. \tag{B.6}$$

PROBLEMA B.2-12 []Determinare lo sviluppo asintotico della funzione di Airy , Eq. (6.6), definita dalla soluzione dell'equazione $y''(x) = x\, y(x)$ che tende a zero per $x \to +\infty$.

$$\Phi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, \exp\left\{ ix\xi + i\tfrac{1}{3}\xi^3 \right\}\,.$$

B.2.4. Trasformata di Borel. Se $\psi(x) = \sum_0^\infty a_n x^n$ è convergente per $|x| < \rho$, definiamo la **trasformata di Borel**

$$\chi(x) = \sum_0^\infty \frac{a_n}{n!} x^n,$$

con raggio di convergenza infinito. Si trova allora

$$\int_0^\infty \chi(xt) e^{-t}\, dt = \int_0^\infty \sum \frac{a_n}{n!} (xt)^n\, e^{-t}\, dt = \sum_0^\infty a_n x^n = \psi(x)\,.$$

Dunque l'integrale $\int_0^\infty \chi(xt)\, e^{-t}\, dt$ coincide con ψ all'interno del cerchio di convergenza, ma in generale permette di estendere analiticamente la funzione ψ in una regione più vasta (questa regione è determinata dalla regione convessa individuata portando le tangenti al cerchio in tutte le singolarità di ψ, vedi [**WW69**]).

Può accadere che questo procedimento *permetta di risommare una serie divergente* (*asintotica*). Si consideri ad esempio

$$f(x) \sim \sum n!\,(-x)^n$$

(che diverge per ogni $x \neq 0$). La trasformata di Borel è in questo caso

$$\chi(x) = \sum(-x)^n = (1+x)^{-1} \Longrightarrow \int_0^\infty \chi(xt)e^{-t}\, dt = \int_0^\infty \frac{e^{-t}dt}{1+xt}$$

(funzione analitica con taglio sull'asse reale negativo).

B.2.5. Sviluppo di Eulero-McLaurin. Per determinare lo sviluppo asintotico di una serie si può talvolta fare ricorso al seguente teorema (Eulero-MacLaurin)

Teorema B.2.1 [] Vale lo sviluppo asintotico

$$\sum_{n=1}^{N} f(n) \simeq \int_1^N f(x)dx + \tfrac{1}{2}[f(N)+f(1)] + \sum_{k\geq 1} \frac{B_{2k}}{(2k)!}[f^{(2k-1)}(N) - f^{(2k-1)}(1)]$$

dove B_n sono i numeri di Bernoulli definiti dalla funzione generatrice

$$\frac{x}{e^x - 1} = \sum_0^\infty \frac{B_n}{n!}x^n \tag{B.7}$$

Per la dimostrazione si veda [**WW69**].

Esempi

a)

$$\begin{aligned} \ln n! &= \sum_{k=1}^{n} \ln k \\ &\sim \int_1^n \ln x\, dx + \tfrac{1}{2}\ln n + \tfrac{1}{12}\left(n^{-1}-1\right) - \tfrac{1}{360}\left(n^{-3}-1\right) + \dots \\ &+ \frac{B_{2k}}{2k(2k-1)}\left(n^{2k-1}-1\right) + \dots \end{aligned} \tag{B.8}$$

equivalente allo sviluppo di Stirling.

b)

$$\begin{aligned} \sum_1^n \frac{1}{k} &= \int_1^n \frac{dx}{x} + \tfrac{1}{2}\left(\frac{1}{n}+1\right) + \sum_1^\infty \frac{B_{2k}}{(2k)!}\left(\frac{1}{x}\right)^{2k-1}\Bigg|_1^n \\ &= \ln n + \tfrac{1}{2}\left(1+\frac{1}{n}\right) + \sum_1^\infty \frac{B_{2k}}{2k}(-)^k\left(n^{-2k}-1\right) \end{aligned}$$

La serie a secondo membro è divergente, tuttavia per consistenza il suo valore è dettato da $\gamma = \lim_{n\to\infty}(\sum_1^n \frac{1}{k} - \ln n) \sim 0.577216$ (costante di Eulero-Mascheroni).

PROBLEMA B.2-13 []Calcolare l'andamento asintotico di $Z(\beta) = \sum_0^\infty n e^{-\beta n}$ per $\beta \to \infty$ attraverso la formula di Eulero-McLaurin e confrontarlo con il valore esatto.

PROBLEMA B.2-14 []Calcolare l'andamento asintotico di

$$Z_\nu(\beta) = \sum_0^\infty n^\nu e^{-\beta n}, \ (\nu > 0) \ .$$

Teorema di Hardy-Littlewood []Sia $\mu(x)$ una misura borelliana su $[0 + \infty)$. Se

$$\int_0^\infty e^{-tx} d\mu(x) \sim A t^{-\nu} \text{per } t \to 0$$

allora

$$\int_0^L d\mu(x) \sim \frac{A}{\Gamma(1+\nu)} L^\nu \text{ per } L \to +\infty.$$

In particolare, si ha anche che

$$\sum_0^\infty e^{-tn} a_n \sim A\, t^{-\nu}, \text{ per } t \to 0$$

implica

$$\sum_0^N a_n \sim \frac{A}{\Gamma(\nu+1)} N^\nu \quad \text{per} \quad N \to +\infty$$

Per la dimostrazione si veda [**Sim79**]. Ad esempio:

$$\begin{aligned}
\sum_0^\infty e^{-tn} n^k &= \left(-\frac{d}{dt}\right)^k \sum_0^\infty e^{-tn} = \left(-\frac{d}{dt}\right)^k (1 - e^{-t})^{-1} \\
&\approx \left(-\frac{d}{dt}\right)^k t^{-1} = k!\, t^{-k-1} \\
\sum_{n=1}^N n^k &\sim \frac{k!\, N^{k+1}}{\Gamma(k+2)} = \frac{N^{k+1}}{k+1}
\end{aligned}$$

Il teorema permette di stimare l'andamento asintotico di $\sum_0^N a_n$ per $N \to \infty$ noto l'andamento asintotico di $\sum_0^\infty a_n e^{-tn}$ per $t \to 0$. Ad esempio se esiste $\lim \sum_0^N a_n / N = \langle a_n \rangle$ allora questo coincide con $\lim_{t \to 0} \{\varepsilon \sum_0^\infty e^{-\varepsilon n} a_n\}$.

Un applicazione del metodo di sommazione di Borel. Nella formula (B.8) che dà $\ln n!$ come sviluppo asintotico in $1/n$ compare il termine finito

$$\log C \sim \frac{1}{12} - \frac{1}{360} + \ldots + \frac{B_{2k}}{2k(2k-1)} + \ldots \ . \tag{B.9}$$

La serie è divergente, ma può essere sommata con il procedimento di Borel. La somma dei primi n termini dà i seguenti risultati parziali (vedi Fig. B-1): 0.08333, 0.08055, 0.08135, 0.08075, 0.08159, 0.07968, 0.08609, 0.05654, 0.23618, -1.1563, 12.247, -144.6, 2048.5, ... e si può dunque congetturare che $\log C \sim 0.081$ sia una buona approssimazione, in quanto le somme parziali oscillano intorno a questo

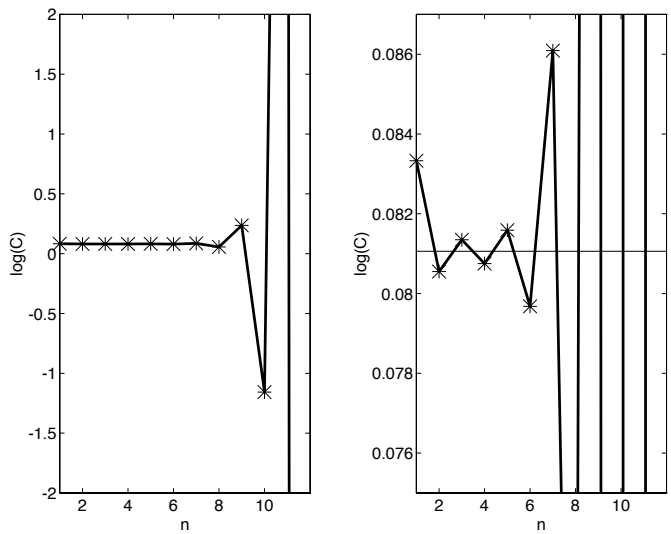


FIGURA B-1. *Le prime somme parziali alla Borel per la serie divergente* (B.9) .

valore prima di cominciare a divergere. Il metodo di Borel consiste nel risommare la funzione

$$f(x) \sim \sum_1^\infty \frac{B_{2n}}{2n(2n-1)} x^{2(n-1)}$$

attraverso la trasformata di Borel

$$\begin{aligned}\Psi(x) &= \sum_1^\infty \frac{B_{2n}}{2n(2n-1)} \frac{x^{2(n-1)}}{[2(n-1)]!} = \sum_1^\infty \frac{B_{2n}}{(2n)!} x^{2(n-1)} \\ &= \frac{1}{x^2}\left(\frac{x}{e^x-1} - 1 + \frac{x}{2}\right)\end{aligned}$$

Si ha perciò

$$f(x) = \int_0^\infty e^{-t}\Psi(xt)\,dt$$

e infine

$$f(1) = \int_0^\infty e^{-t}\frac{1}{t^2}\left(\frac{t}{e^t-1} - 1 + \frac{t}{2}\right) dt = 1 - \tfrac{1}{2}\log(2\pi) \approx .0810615...$$

(L'integrale si trova su [**GR65**] 8.341.1).

B.2.6. Sviluppi asintotici dallo sviluppo di Taylor. Sia $f(x) = \sum_0^\infty a_n x^n$, con raggio di convergenza infinito. Si tratta di ottenere lo sviluppo asintotico $f(x) \sim \psi(x)(1 + c_1/x + c_2/x^2 + \dots)$ per $x \to +\infty$. Un metodo consiste nel trasformare la serie in una rappresentazione integrale; ciò è fattibile ad esempio se

si dispone di una rappresentazione del tipo

$$a_n = \int_C \psi(z)\,\frac{z^n}{n!}\,dz$$

in modo che

$$f(x) = \sum_0^\infty \int_C \psi(z)\,\frac{(xz)^n}{n!}\,dz = \int_C \psi(z)e^{xz}dz$$

a cui poi è possibile applicare il metodo del punto a sella.

PROBLEMA B.2-15 [] Determinare lo sviluppo asintotico per la¡funzione di Bessel di seconda specie definita dalla sua serie di Taylor

$$f(x) = I_0(2x) = \sum_0^\infty \left(\frac{x^n}{n!}\right)^2 .$$

SOLUZIONE *[]Si ha*

$$\frac{1}{n!} = \frac{1}{2\pi i}\oint \frac{e^\zeta}{\zeta^{n+1}}d\zeta$$

da cui

$$\left(\frac{1}{n!}\right)^2 = \frac{1}{2\pi i}\oint \frac{e^\zeta}{n!\zeta^{n+1}}d\zeta .$$

Segue

$$I(x) = \frac{1}{2\pi i}\oint \sum_0^\infty \frac{x^{2n}}{n!\zeta^n}\frac{e^\zeta d\zeta}{\zeta} = \frac{1}{2\pi i}\oint e^{\zeta + x^2\zeta^{-1}}\,\frac{d\zeta}{\zeta}$$

che è analizzabile con il metodo di Laplace dopo avere posto $\zeta = xz$.

PROBLEMA B.2-16 [] Si consideri la serie con raggio di convergenza infinito

$$\begin{aligned} {}_1F_1(a,c;x) &= 1 + \frac{a}{c}x + \frac{a(a+1)}{c(c+1)}\frac{x^2}{2} + \dots \\ &= \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)}\sum_0^\infty \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(c+n)}\frac{x^n}{n!}, \end{aligned}$$

nota come **ipergeometrica confluente**. Determinarne l'andamento asintotico per $x \to \infty$.

SOLUZIONE *[]In base alla definizione della funzione* $B(\alpha,\beta)$

$$\int_0^1 t^{\alpha-1}(1-t)^{\beta-1}\,dt = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta)} \tag{B.10}$$

è sufficiente scegliere $\alpha = a+n$, $\beta = c-a$ *per ottenere secondo lo schema della sezione precedente*

$${}_1F_1(a,c;x) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)}\int_0^1 t^{a-1}(1-t)^{c-a-1}e^{tx}\,dt$$

valida per $\mathfrak{Re}\, c > \mathfrak{Re}\, a > 0$. *Per* $x \to +\infty$ *si ha allora*

$$\begin{aligned}\frac{F(a,c;x)}{e^x} &= \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} \int_0^1 t^{a-1}(1-t)^{c-a-1} e^{-x(1-t)}\, dt \\ &= \frac{\Gamma(c)x^{a-c}}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} \int_0^x e^{-\tau}\tau^{c-a-1}(1-\frac{\tau}{x})^{a-1} d\tau\,.\end{aligned}$$

avendo posto $1-t = \tau/x$. *L'integrale ha limite* $\Gamma(c-a)$ *per* $x \to +\infty$ *e quindi*

$$ {}_1F_1(a,c;x) \sim_{x\to+\infty} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^x x^{a-c}\,. \tag{B.11}$$

Un altro metodo "rozzo ma efficace" consiste nello stimare qual è il termine $a_{\overline{n}} x^{\overline{n}}$ dominante per x molto grande e sommare intorno a $\overline{n}$. Prendiamo l'esempio del Probl. B.2-15:

$$f(x) = \sum_0^\infty \left(\frac{x^n}{n!}\right)^2\,.$$

È chiaro che per x molto grande il valore di $x^n/n!$ dapprima cresce (da 1 per $n = 0$ fino ad un massimo per $n \approx x$) per poi decrescere quando $n \gg x$. Si avrà perciò

$$\begin{aligned}f(x) &= \sum\nolimits_{n=x+\delta}^{\delta} \left(\frac{x^n}{n!}\right)^2 \approx \sum_\delta \left(\frac{x^{x+\delta}e^{x+\delta}}{(x+\delta)^{x+\delta}\sqrt{2\pi(x+\delta)}}\right)^2 \\ &= \sum_\delta \exp\left\{-2(x+\delta)\ln(1+\delta/x) + 2(x+\delta) - \ln(2\pi(x+\delta))\right\}\end{aligned}$$

Sviluppando in serie di potenze in (δ/x) si ha poi

$$f(x) \approx \sum_\delta \exp\left\{2x - \ln(2\pi x) - \frac{\delta}{x} - \frac{\delta^2}{x} + \dots\right\}\,.$$

Se approssimiamo $\sum_\delta$ con $\int d\delta$ (come nello sviluppo di Eulero-McLaurin) otteniamo

$$\begin{aligned}f(x) &\approx \int d\delta\, \frac{e^{2x}}{2\pi x}\, e^{-\delta^2/x - \delta/x} = \frac{e^{2x}}{2\sqrt{\pi x}} \exp\left\{\tfrac{1}{4}x^{-1}\right\} \\ &= \frac{e^{2x}}{2\sqrt{\pi x}}(1 + \tfrac{1}{4}x^{-1} + \dots)\end{aligned}$$

(ricordare la formula di integrazione gaussiana (B.1)). In modo analogo si può stimare l'andamento asintotico di

$$f(p,x) = \sum_0^\infty \left(\frac{x^n}{n!}\right)^p \approx \frac{e^{px}}{\sqrt{p}(2\pi x)^{\frac{p-1}{2}}}\,.$$

B.2.7. Due importanti funzioni speciali.

La funzione Γ *di Eulero.* La funzione di $\Gamma(z)$ è definita dall'integrale

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty e^{-t}\, t^{x-1}\, dt \;(\mathrm{Re}\{x\} > 0)\,. \tag{B.12}$$

Teorema B.2.2 []$\Gamma(x)$ si può estendere a una funzione analitica in tutto il piano complesso tranne per *poli semplici* nei punti $x = 0, -1, -2, \dots, -n, \dots$

Dimostrazione. Si suddivida il cammino di integrazione $(0, \infty)$ in $(0, 1) \cup (1, +\infty)$; si ottiene:

$$\begin{aligned}\Gamma(x) &= \int_1^\infty e^{-t} t^{x-1}\, dt + \int_0^1 t^{x-1} \sum_0^\infty \frac{(-t)^n}{n!} dt \\ &\equiv \Gamma(1, x) + \sum_0^\infty \frac{(-)^n}{n!} \int_0^1 t^{x+n-1} dt \\ &= \Gamma(1, x) + \sum_{n=0}^\infty \frac{(-)^n}{n!} \frac{1}{x+n}\end{aligned}$$

$\Gamma(1, x)$ è analitica regolare per ogni x complesso; la serie $\sum_0^\infty (-)^n\, n!^{-1}/(x+n)$ è convergente per ogni x diverso da un intero non-positivo. Questo mostra che Γ ha poli semplici in $x = -n$ $(n = 0, +1, +2, \dots)$ con residuo $(-)^n/n!$. ■

Integrando per parti si ottiene facilmente l'identità fondamentale $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ e di conseguenza $\Gamma(n+1) = n!$ $(n \in \mathbb{N})$.

Integrali notevoli:

$$\frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} = \int_0^1 dt\, t^{x-1}(1-t)^{y-1} = \int_0^\infty du \frac{u^{y-1}}{(1+u)^{x+y}}$$

$$\Gamma(x)\Gamma(1-x) = \int_0^\infty du \frac{u^{-x}}{1+u} = \frac{\pi}{\sin \pi x}$$

$$\int_0^\infty \frac{e^{-t} - e^{-\lambda t}}{t} dt = \ln \lambda\,.$$

La funzione $\zeta(s)$ di Riemann.

$$\zeta(s) = \sum_1^\infty n^{-s}, \quad (\mathfrak{Re}\, s > 1)\,. \tag{B.13}$$

La serie è uniformemente convergente per $\mathfrak{Re}\, s \geq 1 + \varepsilon > 1$ e definisce perciò una funzione analitica. Più in generale, data una successione di numeri reali positivi con limite $+\infty$

$$0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3 \leq \dots \leq \lambda_n \leq \dots \to +\infty\,.$$

si definisce la "funzione-zeta" generalizzata

$$\zeta_\lambda(s) = \sum_1^\infty \lambda_n^{-s}, \ (\mathfrak{Re}\, s > \sigma)\,.$$

Teorema B.2.3 []Vale l'identità

$$\zeta_\lambda(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \theta(t)\, t^{s-1}\, dt,$$

dove la funzione $\theta(t)$ è definita da

$$\theta(t) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\lambda_n t} .$$

In particolare per la funzione di Riemann si ha

$$\zeta(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{\infty} \frac{t^{s-1}}{e^t - 1} dt .$$

Questa rappresentazione integrale permette di estendere $\zeta(s)$ ad una funzione analitica in tutto il piano complesso ad eccezione del punto $s = 1$ dove si ha un polo semplice. Infatti, scelto un reale positivo a, si ha :

$$\zeta(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{a} \frac{t^{s-1}}{e^t - 1} dt + \frac{1}{\Gamma(s)} \int_a^{+\infty} \frac{t^{s-1}}{e^t - 1} dt .$$

Il secondo integrale è sempre convergente, dunque definisce una funzione analitica regolare. Si ha peraltro per la parte singolare, sviluppando in serie e integrando termine a termine,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{a} \frac{t^{s-1}}{e^t - 1} dt &= \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{a} t^{s-2} \left(\frac{t}{e^t - 1} \right) dt \\
&= \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{a} t^{s-2} \sum_0^{\infty} \frac{B_n}{n!} t^n \, dt \\
&= \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{a} t^{s-2} (1 - \frac{t}{2} + \sum_1^{\infty} \frac{B_{2n}}{(2n)!} t^{2n}) \, dt \\
&= \frac{1}{\Gamma(s)} + \frac{1}{\Gamma(s)} \left[\frac{a^{s-1}}{s-1} - \frac{1}{2} \frac{a^s}{s} + \sum_1^{\infty} \frac{B_{2n}}{(2n)!} \frac{a^{s+2n-1}}{s+2n-1} \right]
\end{aligned}$$

È immediato concludere che l'unico polo che non viene cancellato dallo zero di $1/\Gamma(s)$ è precisamente quello in $s = 1$ con residuo uguale a uno. Inoltre si ha

$$\begin{aligned}
\zeta(-m) &= \lim_{s \to -m} \frac{(s+m)(-)^m}{(m!)^{-1}} \sum_0^{\infty} \frac{B_{m'}}{m'!(s+m'-1)} a^{s+m'-1} \\
&= \begin{cases} 0 & m \text{ pari} \geq 2 \\ -\frac{1}{2} & m = 0 \\ -B_{2n}/2n & m = 2n-1 \end{cases}
\end{aligned}$$

Una relazione notevole è quella, dovuta a Riemann, che lega $\zeta(s)$ a $\zeta(1-s)$:

$$\pi^{-s/2} \Gamma(s/2) \zeta(s) = \pi^{-\frac{1-s}{2}} \Gamma\left(\frac{1-s}{2} \right) \zeta(1-s)$$

ossia la funzione $\pi^{-s/2}\Gamma(s/2)\zeta(s)$ è simmetrica intorno al punto $1/2$. La dimostrazione della relazione di simmetria è interessante in quanto fa uso di una identità (Jacobi) che ha un significato intuitivo (metodo della riflessioni – vedi [**Som64**]).

Il metodo di Hawking. La funzione ζ di Riemann (e la sua generalizzazione al caso di una successione $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n, \ldots \lambda_n \to +\infty$), è alla base di un procedimento di sommazione di prodotti divergenti [**RS71, Haw77**]. Il problema consiste nell'estrarre un risultato finito da un prodotto del tipo

$$X = \prod_1^\infty \lambda_n$$

(divergente perché $\lambda_n \nrightarrow 1$) che può ad esempio rappresentare il determinante di una matrice ad infinite dimensioni con autovalori λ_n. Si introduce

$$\zeta(s) = \sum_1^\infty \lambda_n^{-s}$$

e si considera la quantità

$$\zeta'(s) = -\sum_1^\infty (\ln \lambda_n) \lambda_n^{-s} \ .$$

Se $\zeta(s)$ è estendibile analiticamente a $s = 0$, si pone per convenzione

$$\sum_1^\infty \ln \lambda_n = -\zeta'(0) \Longrightarrow \prod_1^\infty \lambda_n = e^{-\zeta'(0)} \ .$$

Sia ad esempio da calcolare

$$X = \prod_1^\infty (n + \alpha) \ .$$

Allora $\zeta(s) = \sum_1^\infty (n+\alpha)^{-s} \equiv \zeta(s, \alpha+1)$ (funzione di Riemann generalizzata). Si trova

$$\frac{d\zeta(s, \alpha+1)}{\delta s}\Big|_{s=0} = \ln \Gamma(\alpha+1) - \tfrac{1}{2} \ln 2\pi$$

da cui

$$\prod_1^\infty (n+\alpha) = \exp\{-\zeta'(0)\} = \exp\left\{\tfrac{1}{2}\ln 2\pi - \ln \Gamma(\alpha+1)\right\} = \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(\alpha+1)} \ .$$

Per interpretare il risultato calcoliamo il rapporto

$$\prod_{n=1}^\infty \frac{n+\alpha}{n} = \frac{1}{\Gamma(\alpha+1)} = e^{\gamma\alpha} \prod_{n=1}^\infty \left[\left(1 + \frac{\alpha}{n}\right) e^{-\alpha/n}\right]$$

dove si è fatto uso di una rappresentazione della Γ quale prodotto infinito (γ è la costante di Eulero-Mascheroni). In definitiva, il procedimento della ζ di Riemann ha inserito al posto giusto i fattori che rendono convergente il prodotto infinito altrimenti divergente $\prod(1 + \alpha/n)$.
Altro esempio, $\lambda_n = n^2$:

$$\prod_1^\infty n^2 = \exp\{-\zeta'(0)\}$$

$$\zeta(s) = \sum_1^\infty n^{-2s} = \zeta_R(2s)$$

$$\zeta'(s) = 2\zeta_R'(2s) \longrightarrow \zeta'(0) = 2\zeta_R'(0)$$

In generale :

$$\prod_1^\infty \lambda_n^k \longrightarrow \zeta_k(s) = \sum \lambda_n^{-ks} = \zeta_1(ks) \Longrightarrow \prod_1^\infty \lambda_n^k = \left(\prod_1^\infty \lambda_n\right)^k .$$

Sia da calcolare:

$$D = \prod_{n=1}^\infty \left(\frac{\lambda_n}{\mu_n}\right)$$

dove $\lambda_n/\mu_n \sim 1 + O(n^{-1-\varepsilon})$ in modo che il prodotto sia convergente. Allora si ha

$$\sum_1^N \ln(\lambda_n/\mu_n) = \sum_1^N \int_0^\infty \frac{dt}{t}(e^{-\mu_n t} - e^{-\lambda_n t}) .$$

Lo stesso risultato si ottiene dalla funzione ζ:

$$\zeta_x(s) = \sum \lambda_n^{-s},\ \zeta_\mu(s) = \sum \mu_n^{-s}$$

$$\ln \prod (\frac{\lambda_n}{\mu_n}) = \zeta'_\mu(0) - \zeta'_\lambda(0),$$

$$\zeta_\lambda(s) - \zeta_\mu(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty t^{s-1} \left(\sum e^{-\lambda_n t} - \sum e^{-\mu_n t}\right) dt,$$

$$\zeta'_\lambda(s) - \zeta'_\mu(s) = -\frac{\Gamma'(s)}{\Gamma(s)^2} \int_0^\infty t^{s-1} (\sum e^{-\lambda_n t} - \sum e^{-\mu_n t}) dt + \frac{1}{\Gamma(s)} \frac{d}{ds} \int \dots$$

Ma $\Gamma(s) \sim s^{-1}$ per $s \to 0$, dunque

$$\zeta'_\lambda(0) - \zeta'_\mu(0) = \int_0^\infty \frac{dt}{t} (\sum e^{-\lambda_n t} - \sum e^{-\mu_n t}) .$$

Affinché quest'ultima espressione dia un risultato finito è necessario che per $t \to 0$ si abbia

$$\sum_1^\infty e^{-\lambda_n t} - \sum_1^\infty e^{-\mu_n t} @ > t \to 0 >> 0 .$$

Sia ad esempio $\lambda_n = n^2\pi, \mu_n = n^2\pi + \alpha$:

$$\sum_1^\infty e^{-(n^2\pi+\alpha)t} = e^{-\alpha t}(\frac{1}{2\sqrt{t}} - \tfrac{1}{2} + \dots) .$$

e quindi

$$\sum_1^\infty (e^{-\lambda_n t} - e^{-\mu_n t}) = (1 - e^{-\alpha t}) \left(\frac{1}{2\sqrt{t}} - \tfrac{1}{2} + \dots\right) = \frac{\alpha}{2}\sqrt{t} + O(t) .$$

La continuazione analitica a $s = 0$ è quindi calcolabile prendendo il rapporto tra il prodotto divergente e un altro prodotto noto preso come riferimento (in questo caso corrisponde alla scelta $\alpha = 0$). Tecniche di questo genere sono applicate nella teoria dell'integrazione infinito-dimensionale, dove è necessario dare un significato a determinanti di operatori in infinite dimensioni.

B.3. Sistemi di coordinate ortogonali

Un teorema di Staekel afferma che l'equazione di Laplace $\triangle\phi = 0$ è separabile, e quindi ammette una base di soluzioni fattorizzate, solo in sistemi di coordinate le cui superfici di coordinate costanti siano famiglie di quadriche confocali (o coniche confocali nel caso piano). Questo fatto limita i possibili sistemi di coordinate interessanti a una lista finita (si veda [**MS61**] per un'ampia classificazione di sistemi di coordinate ortogonali nel piano). Daremo qui di seguito la definizione di un certo numero di sistemi di coordinate curvilinei con la relativa matrice metrica e la forma che assume l'operatore di Laplace.

i) Coordinate sferiche

$$x = r\sin\vartheta\cos\varphi$$
$$y = r\sin\vartheta\sin\varphi$$
$$z = r\cos\vartheta$$
$$(r \geq 0,\ 0 \leq \vartheta \leq \pi,\ 0 \leq \varphi < 2\pi).$$

$$ds^2 = dr^2 + r^2\,d\vartheta^2 + \sin^2\vartheta\,d\varphi^2$$
$$\triangle\psi = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\psi + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}.$$

ii) Coordinate circolari-cilindriche

$$x = r\cos\varphi$$
$$y = r\sin\varphi$$
$$z = z$$
$$(r \geq 0,\ 0 \leq \varphi < 2\pi).$$

$$ds^2 = dr^2 + r^2\,d\varphi^2 + dz^2$$
$$\triangle\psi = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}.$$

iii) Coordinate paraboliche-cilindriche

$$x = \tfrac{1}{2}(\mu^2 - \nu^2)$$
$$y = \mu\nu$$
$$z = z$$
$$(\mu \geq 0,\ -\infty < \nu < +\infty).$$

$$ds^2 = (\mu^2 + \nu^2)[(d\mu)^2 + (d\nu)^2] + (dz)^2.$$
$$\triangle\psi = (\mu^2 + \nu^2)^{-1}\left[\frac{\partial^2\psi}{\partial\mu^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial\nu^2}\right] + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}.$$

iv) Coordinate ellittico-cilindriche

$$x = a \cosh\eta \cos\varphi$$
$$y = a \cosh\eta \sin\varphi$$
$$z = z$$
$$(\eta \geq 0,\ 0 \leq \varphi < 2\pi).$$

$$ds^2 = a^2(\cosh^2\eta - \cos^2\varphi)[(d\eta)^2 + (d\varphi)^2] + (dz)^2 .$$
$$\triangle\psi = a^{-2}(\cosh^2\eta - \cos^2\varphi)^{-1}\left[\frac{\partial^2\psi}{\partial\eta^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right] + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} .$$

v) Coordinate sferoidali (*prolate*)

$$x = a \sinh\eta \sin\vartheta \cos\varphi$$
$$y = a \sinh\eta \sin\vartheta \sin\varphi$$
$$z = a \cosh\eta \cos\vartheta$$
$$(\eta \geq 0,\ 0 \leq \vartheta < \pi, 0 \leq \varphi < 2\pi).$$

$$ds^2 = a^2(\sinh^2\eta + \sin^2\vartheta)[(d\eta)^2 + (d\vartheta)^2] + +a^2 \sinh^2\eta \sin^2\vartheta (d\varphi)^2 .$$
$$\triangle\psi = a^{-2}(\sinh^2\eta + \sin^2\vartheta)^{-1}\left\{\frac{\partial^2\psi}{\partial\eta^2} + \coth\eta\frac{\partial\psi}{\partial\eta} + \right.$$
$$\left.\frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta^2} + \cot\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right\} + a^{-2}(\sinh\eta\sin\vartheta)^{-1}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} .$$

vi) Coordinate sferoidali (*oblate*)

$$x = a \cosh\eta \sin\vartheta \cos\varphi$$
$$y = a \cosh\eta \sin\vartheta \sin\varphi$$
$$z = a \sinh\eta \cos\vartheta$$
$$(\eta \geq 0,\ 0 \leq \vartheta < \pi, 0 \leq \varphi < 2\pi).$$

$$ds^2 = a^2(\cosh^2\eta - \sin^2\vartheta)[(d\eta)^2 + (d\vartheta)^2] + +a^2 \cosh^2\eta \sin^2\vartheta (d\varphi)^2 .$$
$$\triangle\psi = a^{-2}(\cosh^2\eta - \sin^2\vartheta)^{-1}\left\{\frac{\partial^2\psi}{\partial\eta^2} + \tanh\eta\frac{\partial\psi}{\partial\eta} + \frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta^2} + \cot\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right\}$$
$$+ a^{-2}(\cosh\eta\sin\vartheta)^{-1}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} .$$

vii) Coordinate paraboliche.

$$x = \mu\nu\cos\theta$$
$$y = \mu\nu\sin\theta$$
$$z = \tfrac{1}{2}(\mu^2 - \nu^2),$$
$$(\mu \geq 0,\ \nu \geq 0,\ 0 \leq \theta < 2\pi).$$

$$ds^2 = (\mu^2+\nu^2)[(d\mu)^2+(d\nu)^2]+\mu^2\nu^2(d\theta)^2\,.$$

$$\triangle\psi = (\mu^2+\nu^2)^{-1}\left[\frac{\partial^2\psi}{\partial\mu^2}+\frac{1}{\mu}\frac{\partial\psi}{\partial\mu}+\frac{\partial^2\psi}{\partial\nu^2}+\frac{1}{\nu}\frac{\partial\psi}{\partial\nu}\right]+\frac{1}{\mu^2\nu^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}\,.$$

B.4. Integrazione formale delle equazioni di Hamilton

Dalle equazioni di Hamilton segue che ogni funzione delle variabili canoniche $f(q,p)$ soddisfa la relazione

$$\frac{df}{dt} = \{f,H\}$$

Determiniamo ora una soluzione formale di questa equazione, che pur disponendo di scarso valore pratico mette in luce alcune proprietà generali della dinamica Hamiltoniana. Introduciamo la notazione

$$X_H(f) \equiv \{H,f\}$$

Il simbolo X_H rappresenta un operatore differenziale lineare per il quale ha senso considerare le potenze X_H^n e in generale una serie di potenze $\sum_n c_n X_H^n$. L'equazione del moto è perciò risolta da

$$f(q(t),p(t)) = \exp\{-tX_H\}f(q(0),p(0))$$

Una differenza sostanziale tra la funzione esponenziale nel campo reale o complesso e la stessa funzione applicata a operatori lineari è costituita dal fatto che la serie $\sum_n(-t)^n X_H^n$ non risulta necessariamente convergente per ogni t.

PROBLEMA B.4-17 []Sia $H = q^2p$. Dimostrare che per ogni valore iniziale $q(0),p(0)$ esiste un raggio di convergenza finito per la serie esponenziale $\exp\{-tX_H\}$.

PROBLEMA B.4-18 []Discutere il moto di un oscillatore con frequenza variabile $\omega(t)$, l'Hamiltoniana essendo $H(t) = p^2/2m+m\omega(t)^2q^2/2$, i) nel caso adiabatico ($|d\omega/dt| \ll \omega^2$); ii) nel caso $\omega(t)^2 = \omega_0^2 + f(t)$ con $|f(t)| \ll \omega_0^2$.

PROBLEMA B.4-19 [] Estendere la soluzione formale $\exp\{-tX_H\}$ al caso di una Hamiltoniana dipendente dal tempo.

SOLUZIONE *[]Per risolvere l'equazione* $df/dt = \{f,H(t)\}$ *è necessario uno sviluppo formale in un parametro ausiliario* λ *che porremo uguale a uno alla fine del calcolo. Sostituiamo cioè* $H(t) \to \lambda H(t)$ *e sviluppiamo la soluzione in potenze di* λ. *Si ottiene:*

$$f(q,p) = \sum_n \lambda^n f_n(q,p)$$

$$\sum_n \lambda^n \dot{f}_n(t) = \lambda\left\{\sum \lambda^n f_n, H(t)\right\}$$

il che porta alle relazioni di ricorrenza

$$f_n(t) = \int_0^t \{f_{n-1}(\tau),H(\tau)\}d\tau = -\int_0^t X_{H(\tau)}(f_{n-1}(\tau))d\tau$$

La soluzione è rappresentata da una serie

$$f(\tau) = f(0) - \int_0^t X_{H(\tau)}(f(0))d\tau + \int_0^t\int_0^\tau d\tau d\tau' X_{H(\tau)}X_{H(\tau)'}(f(0)) + \cdots$$

che è riconducibile ad una esponenziale a patto di riordinare simbolicamente tutti gli operatori $X_{H(t)}$ *in modo che i rispettivi argomenti siano decrescenti da sinistra a destra. Poniamo*

$$\mathbb{T}\left(X_{H(t_1)}X_{H(t_2)}\right) = \begin{cases} X_{H(t_1)}X_{H(t_2)} & t_1 > t_2 \\ X_{H(t_2)}X_{H(t_1)} & t_1 < t_2 \end{cases}$$

e in generale

$$\mathbb{T}\left(X_{H(t_1)}X_{H(t_2)}\cdots X_{H(t_n)}\right) = X_{H(t_{i_1})}X_{H(t_{i_2})}\cdots X_{H(t_{i_n})}$$

dove gli indici $(i_1, \cdots, i_n)$ *individuano quella permutazione di* $(1, \cdots, n)$ *tale che* $t_{i_1} > t_{i_2} > \cdots > t_{i_n}$. *La soluzione si può allora esprimere sinteticamente nel modo seguente*

$$f(t) = \mathbb{T}\left(\exp\left\{-\int_0^t X_{H(\tau)}d\tau\right\}\right)f(0) \tag{B.1}$$

La formula precedente si applica in generale alla soluzione di problemi lineari del tipo

$$\frac{dx(t)}{dt} = H(t)x(t)$$

*in particolare si incontra questo tipo di costrutto nella soluzione di problemi di meccanica quantistica in campo esterno dipendente dal tempo (*esponenziali $\mathbb{T}$-ordinati*, vedi §10.1.4).*

B.5. La funzione $\delta(x)$ di Dirac

La funzione $\delta(x)$ è introdotta da Dirac come analogo continuo della δ_{ij} di Kronecker. Formalmente di ha

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } x \neq 0 \\ +\infty & \text{per } x = 0 \end{cases}$$

in modo tale che $\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x)\,dx = 1$. Una definizione più precisa si dà in termini di **funzionali lineari**. Dato uno spazio di funzioni $\mathcal{F}$ sui reali, che assumiano infinitamente differenziabili e a descrescita rapida all'infinito, definiamo il funzionale lineare $\delta(f) = f(0)$. Il funzionale è formalmente identificabile con

$$\delta(f) = \int dx\,\delta(x)\,f(x)\,,$$

con una disinvolta applicazione del teorema della media. La teoria delle distribuzioni insegna a dare un significato matematico preciso a queste espressioni formali. Ci limitiamo qui a dare un elenco di proprietà della δ e delle distribuzioni ad essa collegate, rimandando per una trattazione dettagliata ai testi di matematica (si vedano [**Lig64, BRS93**] o l'appendice A su [**Mes62**]).

a) Rappresentazioni della $\delta(x)$.

$$\delta(x) = \lim_{L\to\infty} \int_{-L}^{L} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx}$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - 2n\pi) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{inx}$$

$$\delta(x) = \lim_{\sigma\to 0} (2\pi\sigma)^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{x^2}{2\sigma}\right\}$$

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2}$$

$$\delta(x) = \frac{d\epsilon(x)}{dx}, \quad \epsilon(x) = \frac{x}{|x|}$$

$$\delta(x) = \frac{d\theta(x)}{dx}, \quad \theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{2\varepsilon} \theta(-|x - \varepsilon|)$$

b) Derivate della $\delta(x)$

$$\int \frac{d\delta(x)}{dx} f(x)\, dx = -f'(0)$$

$$\int \frac{d^n\delta(x)}{dx^n} f(x)\, dx = (-)^n f^{(n)}(0)$$

c) Proprietà varie

$$x\,\delta(x) \equiv 0$$

$$x\,\delta'(x) \equiv -\delta(x)$$

$$\delta(f(x)) = \sum_{\substack{\{x_n | f(x_n)=0\} \\ f'(x_n)\neq 0}} \frac{\delta(x - x_n)}{|f'(x_n)|}$$

d) Relazione con la parte principale di Cauchy (il simbolo P indica la parte principale di Cauchy dell'integrale singolare).

$$\frac{1}{x + i\varepsilon} = P\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\,\delta(x) \equiv -2\pi i\,\delta_+(x)$$

$$\frac{1}{x - i\varepsilon} = P\left(\frac{1}{x}\right) + i\pi\,\delta(x) \equiv 2\pi i\,\delta_-(x)$$

$$P\left(\frac{1}{x}\right) = \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2}$$

$$\delta_+(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dk\, \exp\{-\varepsilon k + ikx\}$$

$$\delta_-(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{0} dk\, \exp\{-\varepsilon k + ikx\}$$

e) Teorema di Poincaré-Bertrand (scambio di integrali in parte principale di Cauchy, si veda [**Tri85**])

$$P\int_a^b \frac{dy}{y-z}\, P\int_a^b \frac{f(x,y)\,dx}{x-y} = P\int_a^b dx\, P\int_a^b \frac{f(x,y)dy}{(y-z)(x-y)} - \pi^2 f(z,z)\,.$$

B.6. Metodo di Laplace

Equazioni differenziali lineari omogenee della forma

$$F(y,x) \equiv (a_n + b_n x)\frac{d^n y}{dx^n} + (a_{n-1} + b_{n-1}x)\frac{d^{n-1}y}{dx^{n-1}} + \ldots + (a_0 + b_0 x)y = 0$$

ammettono soluzione in termini di una rappresentazione integrale che si presta spesso ad un'analisi esatta [**Gou59**]. Il metodo, detto di Laplace, consiste nella sostituzione

$$y(x) = \int_\Gamma Z(z)e^{zx}dz$$

dove z è una variabile complessa e Γ è un cammino da determinarsi nel corso della soluzione. Derivando sotto segno di integrale si ottiene

$$F(y,x) = \int_\Gamma e^{zx}\,(P(z) + Q(z)x)\; Z(z)\,dz$$

dove i polinomi P, Q sono dati in termini dei coefficienti dell'equazione:

$$P(z) = \sum_{k=0}^{n} a_k z^k,\; Q(z) = \sum_{k=0}^{n} b_k z^k.$$

Si nota che l'integrando risulta un differenziale esatto nel caso che

$$\frac{d}{dz}(QZ) = PZ$$

che implica

$$Z(z) = \frac{1}{Q(z)}\exp\left\{\int \frac{P(z)}{Q(z)}\,dz\right\}.$$

Si avrà perciò

$$F(y,x) = \int_\Gamma d(ZQe^{zx}) = Z(z)Q(z)\,e^{zx}\Big|_{z_1}^{z_2}$$

avendo indicato con z_1, z_2 gli estremi del cammino Γ. L'equazione $F(y,x) = 0$ si riduce pertanto al problema di determinare il cammino di integrazione in modo che ZQe^{zx} assuma lo stesso valore agli estremi.

B.6.1. Ipergeometrica confluente. Un'equazione differenziale del secondo ordine della forma generale

$$u''(x) + \left(A + \frac{B}{x}\right) u'(x) + \left(C + \frac{D}{x} + \frac{E}{x^2}\right) u = 0.$$

ammette un gruppo di sostituzioni che ne lascia inalterata la forma a meno di una ridefinizione dei coefficienti: si ponga

$$u = x^\rho \exp\{\alpha x\} f(x).$$

Allora l'equazione si trasforma in un'altra della stessa classe, con parametri differenti $(A', \dots, E')$, secondo la tabella

$$A' = A + 2a, \quad B' = B + 2\rho, \quad C' = C + aA + a^2 \tag{B.1}$$

$$D' = D + aB + (A + 2a)\rho, \quad E' = E + (B - 1)\rho + \rho^2 \tag{B.2}$$

La scelta di a, ρ che fissa $C' = E' = 0$ riconduce l'equazione ad una forma canonica, risolubile con il metodo di Laplace; introducendo la variabile $\zeta = -2A'x$, e le nuove costanti $a = D'/A'$, $c = B'$, l'equazione diventa

$$\zeta \frac{d^2 f}{d\zeta^2} + (c - \zeta)\frac{df}{d\zeta} - af = 0$$

nota come **ipergeometrica confluente** (vedi ad es. [**WW69, Cop35, Hoc71**]), la cui soluzione generale è data da

$$f(\zeta) = c_1\, {}_1F_1(a, c; \zeta) + c_2 \zeta^{1-c}\, {}_1F_1(a - c + 1, 2 - c; \zeta).$$

Della funzione ${}_1F_1$ basta ricordare lo sviluppo in serie (con raggio di convergenza infinito)

$${}_1F_1(a, c; x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k}{(c)_k} \frac{x^k}{k!}$$

e l'andamento asintotico per grandi valori dell'argomento (vedi il Probl. B.2-16 a p. 499)

$${}_1F_1(a, c; x) \sim \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^x x^{a-c}, \ (x \to +\infty)\,. \tag{B.3}$$

Per $\mathfrak{Re}\, c > \mathfrak{Re}\, a > 0$ esiste inoltre una rappresentazione integrale (cfr. App. B.2), che si ottiene applicando il metodo del paragrafo precedente:

$$\begin{array}{ccc} a_0 = -a & a_1 = c & a_2 = 0 \\ b_0 = 0 & b_1 = -1 & b_2 = 1 \end{array}$$

da cui si ottiene immediatamente

$$f(\zeta) \propto \int_0^1 z^{a-1}(1 - z)^{c-a-1} e^{z\zeta}\, dz$$

B.6.2. Funzioni di Bessel. L'equazione

$$y'' + \frac{1}{x}y' + \left(1 - \frac{n^2}{x^2}\right)y = 0$$

è nota come equazione di Bessel ed appare in numerosi problemi di teoria di campo in simmetria cilindrica. La sostituzione $y(x) = x^n\,\Phi(x)$ riconduce l'equazione alla forma risolubile con il metodo di Laplace:

$$x\,\Phi'' + (2n+1)\,\Phi' + x\,\Phi = 0.$$

Si ottiene quindi la rappresentazione integrale per la soluzione *regolare in* $x = 0$

$$\Phi(x) = \int_{-1}^{1} e^{ixt}\,(1-t^2)^{n-1/2}\,dt.$$

Per una lista completa delle proprietà note delle funzioni di Bessel si vedano ad esempio [**Erd55, Hoc71, AS65**].

L'equazione di Schroedinger della particella libera in coordinate polari

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u_{lk}(r) = 0$$

si riconduce all'equazione di Bessel. Si può però ottenere direttamente la soluzione in termini espliciti applicando il metodo di Laplace. Sia $u_{l,k} = r^{l+1}\phi_l(kr)$. L'equazione diventa ($\xi \equiv kr$)

$$\xi\phi_l'' + 2(l+1)\phi_l' + \xi\phi_l = 0.$$

Secondo lo schema generale si ha

$$\begin{array}{ccc} a_0 = 0 & a_1 = 2(l+1) & a_2 = 0 \\ b_0 = 1 & b_1 = 0 & b_2 = 1 \\ P(z) = 2(l+1) & Q(z) = z^2+1 & \end{array}$$

da cui

$$Z(z) = \frac{1}{z^2+1}\exp\left\{\int \frac{2(l+1)z}{z^2+1}\,dz\right\} = (1+z^2)^l.$$

Per far sì che $QZe^{z\xi}$ si annulli agli estremi del cammino di integrazione è sufficiente scegliere quest'ultimo come il segmento che congiunge i e $-i$. Troviamo perciò

$$\phi_l(\xi) = \mathcal{N}\int_{-i}^{i} e^{z\xi}(1+z^2)^l\,dz = \mathcal{N}\int_{-1}^{1}(1-t^2)^l\exp(it\xi)\,dt\,.$$

È facile verificare, a partire da questa rappresentazione, che tutte le funzioni ϕ_l si possono ottenere per derivazione a partire da $l = 0$. Infatti

$$\frac{d}{dz}\phi_l(\xi) = -\frac{\xi}{2(l+1)}\phi_{l+1}(\xi)$$

come si controlla integrando per parti. Per ricorrenza a partire da

$$\phi_0(\xi) = \sin\xi/\xi$$

si ottiene allora

$$\phi_l(\xi) = (-1)^l\left(\frac{1}{\xi}\frac{d}{d\xi}\right)^l\frac{\sin\xi}{\xi}$$

che mostra che le soluzioni sono esprimibili in termini di funzioni trigonometriche. Interessa conoscere il comportamento per grandi valori di ξ; questo si ottiene agevolmente tenendo conto che il termine dominante per $\xi \to \infty$ si ottiene facendo commutare $1/\xi$ con la derivata (i commutatori contengono derivate di potenze negative che tendono a zero più rapidamente). Si ha allora

$$\phi_l(\xi) \sim (-1)^l \xi^{-l} \frac{d^l}{d\xi^l} \frac{\sin \xi}{\xi} \sim \frac{\sin(\xi - l\pi/2)}{\xi^{l+1}}$$

La funzione d'onda radiale si riconduce alla ϕ_l e precisamente

$$R_{lk}(r) = (kr)^l \phi_l(kr) \equiv j_l(kr)$$

nota come **funzione di Bessel sferica** che presenta l'andamento asintotico

$$R_{lk}(r) \sim \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr}.$$

Una seconda soluzione linearmente indipendente, singolare a $r = 0$, indicata con n_l, si ottiene per ricorrenza a partire da $n_0(kr) = -\cos(kr)/kr$, avente andamento asintotico sfasato di $\pi/2$ rispetto alla j_l. Il comportamento per piccoli valori dell'argomento è il seguente

$$\begin{aligned} j_l(x) &\underset{x\approx 0}{\sim} \frac{x^l}{(2l+1)!!} \\ n_l(x) &\underset{x\approx 0}{\sim} -\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}} \end{aligned} \tag{B.4}$$

Interessa anche la soluzione nel caso di k immaginario che si presenta nei problemi di stati legati:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) u_{lk}(r) = 0 u = r^{-l} v(r) \longrightarrow r v'' - 2l v' - k^2 r v = 0\,,$$

e da quest'ultima con il metodo di Laplace si ottiene

$$v_l(r) = \int_\Gamma \frac{e^{zkr}}{(z^2-1)^{l+1}}\, dz.$$

La scelta del cammino è cruciale per selezionare l'andamento asintotico in $r \to \infty$. Se, ad esempio, cerchiamo una soluzione che si comporti come $\exp(-kx)$ si sceglierà per Γ un cammino semplice chiuso intorno al polo $z = -k$. Applicando la formula integrale di Cauchy, si ottiene

$$v_l(kr) \propto \frac{\partial^l}{\partial z^l} \left(\frac{e^{zr}}{(z-k)^l}\right)\Big|_{z=-k}.$$

Si osservi che queste soluzioni sono note in letteratura con il simbolo K e precisamente si ha l'identificazione

$$K_{l+1/2}(kr) = (-2)^l \sqrt{\frac{2\pi}{kr}} v_l(r).$$

B.6.3. Sviluppo dell'onda piana in onde sferiche. Per lo studio dell'equazione di Schroedinger in campo centrale è importante sapere sviluppare un'onda piana in soluzioni fattorizzate in coordinate polari. Se si sceglie l'asse z nella direzione dell'onda piana si ottiene facilmente ($kr \equiv \xi$, $t \equiv \cos\vartheta$)

$$\exp\{i\xi t\} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(\xi)\, P_l(t) \tag{B.5}$$

Si faccia uso della definizione

$$j_l(\xi) = \tfrac{1}{2}\frac{\xi^l}{2^l l!}\int_{-1}^{1}(1-x^2)^l e^{i\xi x}\,dx$$

e della formula di Rodriguez per i polinomi di Legendre

$$P_l(t) = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\frac{d^l}{dt^l}(1-t^2)^l.$$

Dato che le funzioni $j_l(kr)P_l(\cos\vartheta)$ costituiscono una base per le autofunzioni di energia fissata $\hbar^2k^2/2m$, si tratta solo di trovare le costanti a_l tali che

$$e^{ikr\cos\vartheta} = \sum a_l\, j_l(kr)\, P_l(\cos\vartheta).$$

Lo sviluppo in serie si può invertire sfruttando l'ortogonalità dei polinomi di Legendre

$$\int_{-1}^{1} P_l(t)\, P_n(t)\, dt = \frac{2}{2l+1}\delta_{ln} \tag{B.6}$$

e integrando per parti l volte.

B.7. Integrali multidimensionali

B.7.1. Integrali gaussiani. Gran parte delle applicazioni che fanno uso di metodi della teoria delle perturbazioni (in special modo in teoria quantistica dei campi) sono basate su un ingrediente elementare: l'integrazione di polinomi su una misura gaussiana. L'integrale generale di cui si fa uso è il seguente

$$I(\boldsymbol{A},\boldsymbol{m}) = \int\cdots\int_{\mathbb{R}^N} dx_1\,dx_2\cdots dx_N\, \exp\left\{-\tfrac{1}{2}\sum A_{ij}x_ix_j + \sum m_ix_i\right\}$$

dove A è una matrice *simmetrica e positiva definita*, e m è un vettore reale arbitrario. Conviene adottare per semplicità la notazione matriciale per cui si indicherà con $\boldsymbol{A}$ la matrice di elementi A_{ij}, con $\boldsymbol{A}^t$ la sua trasposta. Se $\boldsymbol{m}$ è un vettore (colonna), $\boldsymbol{m}^t$ è lo stesso vettore considerato come matrice a una riga e N colonne. L'esponente nella formula precedente è pertanto $-\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^t\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{m}^t\boldsymbol{x}$. Il calcolo si effettua per riduzione al caso più semplice che corrisponde a $\boldsymbol{m} = 0$ attraverso la sostituzione $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} + \boldsymbol{a}$ che permette di eliminare il termine all'esponente lineare in $\boldsymbol{x}$ (scegliendo $\boldsymbol{a} = (\boldsymbol{A}^t)^{-1}\boldsymbol{m}$). Si ha allora

$$I(\boldsymbol{A},\boldsymbol{m}) = \exp\left\{\tfrac{1}{2}\boldsymbol{m}^t\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{m}\right\}\, I(\boldsymbol{A},0).$$

A questo punto il semplice integrale

$$I_0(\boldsymbol{A}) \equiv \int\cdots\int_{\mathbb{R}^N} dy_1\cdots dy_N\, \exp\left\{-\tfrac{1}{2}\boldsymbol{y}^t\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}\right\}$$

si valuta senza difficoltà ruotando il sistema di coordinate in modo che la matrice $\boldsymbol{A}$ risulti diagonale; l'integrale allora si fattorizza in N integrali in una singola variabile ben noto dalla statistica elementare

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{x^2}{2\sigma} + ikx\right\} dx = \sqrt{2\pi\sigma}\, \exp\{-\tfrac{1}{2}\sigma k^2\}\,. \tag{B.1}$$

Il prodotto degli autovalori coincide con il determinante e quindi si ottiene il risultato finale

$$I(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{m}) = (2\pi)^{\frac{1}{2}N} (\det \boldsymbol{A})^{-\frac{1}{2}} \exp\{\tfrac{1}{2}\boldsymbol{m}^t \boldsymbol{A}^{-1} \boldsymbol{m}\}$$

Il tipico integrale da calcolare corrisponde ai momenti della distribuzione gaussiana

$$\langle x_{k_1}\, x_{k_2} \cdots x_{k_r} \rangle = \frac{\int\!\cdots\!\int_{\mathbb{R}^N} dx_1 \cdots dx_N\, x_{k_1}\, x_{k_2} \cdots x_{k_r} \exp\{-\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^t \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}\}}{\int\!\cdots\!\int_{\mathbb{R}^N} dx_1 \cdots dx_N \exp\{-\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^t \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}\}}$$

che si possono ottenere dall'integrale $I(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{m})$ derivando rispetto alle variabili $m_{k_1}, \ldots, m_{k_r}$ e ponendo $\boldsymbol{m} = 0$. Ad esempio

$$\langle x_i x_j \rangle = \frac{\partial}{\partial m_i} \frac{\partial}{\partial m_j} \exp\left\{\tfrac{1}{2}\boldsymbol{m}^t \boldsymbol{A}^{-1} \boldsymbol{m}\right\}\Big|_{\boldsymbol{m}=0} = (A^{-1})_{ij}$$

Più in generale vale il seguente risultato (**teorema di Wick**):

$$\langle x_{k_1}\, x_{k_2} \cdots x_{k_{2l}} \rangle = \sum_{\pi \in S_{2l}}{}' A^{-1}_{\pi(k_1)\pi(k_2)} A^{-1}_{\pi(k_3)\pi(k_4)} \cdots A^{-1}_{\pi(k_{2l-1})\pi(k_{2l})}\,,$$

dove S_n è il gruppo delle permutazioni su n elementi e l'apice in $\sum'$ indica che la somma va estesa a tutti gli accoppiamenti *distinti* degli indici. L'analogo integrale per un numero dispari di fattori è zero per simmetria. Ad esempio

$$\langle x_1 x_2 x_3 x_4 \rangle = A^{-1}_{12} A^{-1}_{34} + A^{-1}_{13} A^{-1}_{24} + A^{-1}_{14} A^{-1}_{23}$$

Per $N = 1$ si riottengono i momenti della gaussiana

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp\{-\frac{\tau^2}{2\sigma}\}}{\sqrt{2\pi\sigma}} \tau^m d\tau = \begin{cases} 0 & \text{per } m \text{ dispari} \\ \dfrac{(2n)!}{2^n n!} \sigma^n & \text{per } m = 2n \end{cases} \tag{B.2}$$

B.7.2. La formula di integrazione di Feynman. La formula seguente trova applicazione nel calcolo degli integrali che ricorrono spesso in teoria delle perturbazioni e in teoria dello scattering:

$$\frac{1}{a_1 a_2 \ldots a_n} = \int_0^1 d\alpha_1 \int_0^1 d\alpha_2 \ldots \int_0^1 d\alpha_n \frac{(n-1)!\delta\left(1 - \sum_{j=1}^n \alpha_j\right)}{[a_1\alpha_1 + a_2\alpha_2 + \ldots a_n\alpha_n]^n}\,.$$

La formula è applicata solitamente con $a_i = m^2 + k_i^2$ e permette una certa economia di calcolo quando sono presenti più propagatori.

Una dimostrazione si può fornire per ricorrenza. Introducendo le nuove variabili z tali che

$$\alpha_1 = z_1 - z_2,\ \alpha_2 = z_2 - z_3, \ldots, \alpha_{n-1} = z_{n-1} - z_n,\ \alpha_n = z_n,$$

si trasforma l'integrale nella forma

$$\Psi_n(a_1, a_2, \ldots, a_n) =$$
$$\int_0^1 dz_1 \int_0^{z_1} dz_2 \ldots\ldots \int_0^{z_{n-1}} dz_n \frac{(n-1)!\,\delta(1-z_1)}{[a_n z_n + a_{n-1}(z_{n-1} - z_n) + \ldots a_1(z_1 - z_2)]^n}$$

che si trasforma facilmente nella seguente

$$\int\!\!\ldots\!\!\int_{\mathcal{I}_n} \frac{(n-1)!\,dz_2 \ldots dz_n}{[(a_n - a_{n-1})z_n + (a_{n-2} - a_{n-1})z_{n-1} + \ldots (a_1 - a_2)z_2 + a_1]^n},$$

dove il campo di integrazione è dato da $\mathcal{I}_n = \{0 \le z_n \le z_{n-1} \le \ldots \le z_2 \le 1\}$. Integrando su z_n si ottiene la formula di ricorrenza

$$\Psi_n(a_1, \ldots, a_n) = \frac{\Psi_{n-1}(a_1, \ldots, a_{n-2}, a_n) - \Psi_{n-1}(a_1, \ldots, a_{n-2}, a_{n-1})}{a_{n-1} - a_n}.$$

Dal momento che ovviamente si ha $\Psi_1(a_1) = 1/a_1$, la formula risulta dimostrata per induzione.

B.8. Regole di corrispondenza

Il problema di costruire un operatore autoaggiunto per ogni assegnata funzione classica $f(p, q)$ non ammette soluzione univoca, come abbiamo sottolineato al cap. 5. Sono state proposte varie regole di corrispondenza, ognuna delle quali presenta qualche proprietà speciale. Una "ricetta" generale è stata data da Mizrahi [**Miz75**] e messa in relazione con la più generale definizione di *integrale sui cammini*. La conclusione cui si giunge è che *lo stesso grado di arbitrarietà che affligge ogni metodo di corrispondenza si riflette nella definizione dell'integrale sui cammini*, di cui noi abbiamo visto soltanto una possibile formulazione nell'App. A.1. Diamo di seguito la formula generale di corrispondenza:

$$H(p, q) \to$$
$$\mathcal{H} = (2\pi\hbar)^{-2} \int dp\, dq\, du\, dv\, F(u, v)\, H(p, q)\, \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[(q - \mathfrak{q})u + (p - \mathfrak{p})v]\right\},$$

dove $\mathfrak{q}, \mathfrak{p}$ sono gli operatori canonici e $F(u, v)$ è una funzione che caratterizza la particolare regola. Il caso $F \equiv 1$ è noto come **metodo di Weyl** (si veda ad es.[**Lee81**]); per Hamiltoniana polinomiale si può esplicitare la regola in forma differenziale:

$$q^m p^n \to \left(q - i\hbar\frac{\partial}{\partial u}\right)^m \left(p - i\hbar\frac{\partial}{\partial v}\right)^n e^{\frac{1}{2}iuv/\hbar}\Big|_{u=v=0}.$$

PROBLEMA B.8-20 []Applicare il metodo di Weyl a i) $H = q^2 p$, ii) $H = q^2 p^2$, iii) $H = f(q)\, p^2$.

B.9. Decomposizione spettrale

Per ogni operatore autoaggiunto esiste una rappresentazione del tipo

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} x \, d\,\hat{E}_x$$

dove gli operatori $\hat{E}_x$ costituiscono una *famiglia spettrale* e cioè soddisfano alle seguenti proprietà:
a) per ogni x reale, $\hat{E}_x$ è un operatore di proiezione ortogonale su un sottospazio lineare dello spazio di Hilbert;
b) per ogni vettore $|\psi\rangle$ e per ogni coppia $x < y$ si ha $\langle\psi|\,\hat{E}_x\,|\psi\rangle < \langle\psi|\,\hat{E}_y\,|\psi\rangle$;
c) $\lim\limits_{x\to-\infty} \hat{E}_x = 0$;
d) $\lim\limits_{x\to-\infty} \hat{E}_x = \mathbb{1}$;
e) $\lim\limits_{\varepsilon\to 0+} \|(\hat{E}_{x+\varepsilon} - \hat{E}_x)\,|\psi\rangle\| = 0$.
Abbiamo utilizzato le notazioni seguenti: $\|.\|$ indica la norma del vettore, 0 è l'operatore nullo e $\mathbf{1}$ è l'operatore unità e infine il limite per $\varepsilon \to 0+$ si intende per valori strettamente positivi di ε. Dalla definizione segue facilmente che

$$\hat{E}_x\hat{E}_y = \hat{E}_y\hat{E}_x = \hat{E}_x, \; x < y$$

Si ha allora che ogni funzione $f(A)$ può essere definita attraverso l'integrale

$$f(A) := \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, d\,\hat{E}_x$$

L'integrale rispetto alla famiglia spettrale deve intendersi secondo la seguente costruzione: sia $f(x)$ continua in un intervallo (a, b). Suddividiamo l'intervallo in n parti introducendo i punti $x_0 = a, x_1, x_2, \ldots, x_{n-1}, x_n = b$. Formiamo poi le somme parziali

$$S_n = \sum_{k=1}^{n} f(x_k)(\hat{E}_{x_k} - \hat{E}_{x_{k-1}})$$

e mandiamo $n \to \infty$ in modo che tutti gli intervalli parziali tendano uniformemente a zero. Il limite di S_n definisce allora l'integrale $\int_a^b f(x) d\hat{E}_x$. Proprietà importante dell'integrale è la seguente

$$\left\| \int_a^b f(x) d\hat{E}_x\,|\psi\rangle \right\| = \int_a^b |f(x)|^2 d\langle\psi|\,\hat{E}_x\,|\psi\rangle$$

La famiglia spettrale caratterizza interamente l'operatore autoaggiunto, in particolare il suo *spettro*. L'asse reale è suddiviso in tre sottoinsiemi: $R(A), P\sigma(A)$ e $C\sigma(A)$ così determinati:
a) $R(A)$ (detto l'insieme risolvente[7]) è costituito dai punti x tali che $\hat{E}_x$ è costante in un intorno di x; i punti di $R(A)$ *non contribuiscono alla decomposizione spettrale*;

[7] In generale si dice *insieme risolvente* dell'operatore A l'insieme dei punti complessi z tali che l'operatore $(z\mathbf{1} - A)^{-1}$ è invertibile e l'inverso è un operatore limitato. $R(A)$ è dato dall'intersezione dell'insieme risolvente con l'asse reale.

b) $P\sigma(A)$ (lo **spettro discreto**) è costituito dai punti di *discontinuità* di $\hat{E}_x$: e cioè

$$P\sigma(A) = \{x | \lim_{y \to x-} \hat{E}_y \neq \hat{E}_x\}$$

c) $C\sigma(A)$ (lo **spettro continuo**) è costituito dai punti x in cui $\hat{E}_y$ è continuo anche da sinistra in x, ma non è costante in alcun suo intorno.
Si verifica facilmente che i punti dello spettro discreto corrispondono agli *autovalori* di A nel senso che per ogni $x \in P\sigma(A)$ esiste almeno un vettore $\langle x|$ tale che

$$A \langle x| = x \langle x| \ .$$

Si ha infatti

$$\begin{aligned}
A(\hat{E}_x - \hat{E}_{x-\varepsilon})|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} y d\hat{E}_y (\hat{E}_x - \hat{E}_{x-\varepsilon}) |\psi\rangle = \\
\int_{-\infty}^{\infty} y d\hat{E}_y \hat{E}_x |\psi\rangle &- \int_{-\infty}^{\infty} y d\hat{E}_y \hat{E}_{x-\varepsilon} |\psi\rangle = \\
\int_{-\infty}^{x} y d\hat{E}_y |\psi\rangle &- \int_{-\infty}^{x-\varepsilon} y d\hat{E}_y |\psi\rangle = \\
\int_{x-\varepsilon}^{x} y d\hat{E}_y |\psi\rangle &\sim x(\hat{E}_x - \hat{E}_{x-\varepsilon}) |\psi\rangle
\end{aligned}$$

L'operatore $P_x = \lim_{\varepsilon \to 0+} (\hat{E}_x - \hat{E}_{x-\varepsilon})$ perciò proietta nel sottospazio delle soluzioni dell'equazione agli autovalori $A|\psi\rangle = x|\psi\rangle$. La decomposizione spettrale si scriverà più esplicitamente

$$f(A) = \sum_{x \in P\sigma(A)} f(x) P_x + \int_{x \in C\sigma(A)} f(x) d\hat{E}_x$$

Costanti fisiche

Per una lista più completa si veda [**Par94**] ottenibile anche via *internet* all'indirizzo `http://www-pdg.lbl.gov`.

velocità della luce	c	$299792458\,\mathrm{m\,s^{-1}}$
costante di Planck	h	$6.626 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$
costante di Planck (ridotta)	$\hbar = h/2\pi$	$6.582 \times 10^{-22}\,\mathrm{MeV\ s}$
lunghezza d'onda di De Broglie	h/p	$1.240 \times 10^{-6}\,\mathrm{m}\ (p = 1.\,\mathrm{eV}/c)$
carica elettronica	e	$1.602\,10^{-19}\,\mathrm{C}$
costante di struttura fine	$\alpha = e^2/\hbar c$	$1/137.0359895(61)$
fattore di conversione	$\hbar c$	$197.33\,\mathrm{MeV\ fm}$
massa elettronica	m_e	$0.511\,\mathrm{MeV}/c^2$
raggio di Bohr	$a = \hbar^2/m_e e^2$	$0.529\ \text{Å}$
magnetone di Bohr	$\mu_B = e\hbar/m_e c$	$0.579 \times 10^{-10}\,\mathrm{MeV\ T^{-1}}$
raggio classico (elettrone)	$r_e = e^2/m_e c^2$	$0.282\ ^{-12}\,\mathrm{cm}$
lunghezza d'onda Compton	$\hbar/m_e c$	$0.386\ \times 10^{-10}\ \mathrm{cm}$
lunghezza d'onda di De Broglie	$h/\sqrt{2m_e E}$	$12.3\sqrt{E_0/E}\ \text{Å},\ E_0 = 1\,\mathrm{eV}$
dipolo magnetico (elettrone)	μ_e	$1.0011596522\ e\hbar/2m_e c$
costante di Rydberg hcR_∞	$m_e c^2 \alpha^2/2$	$13.61\ \mathrm{eV}$
massa protonica	m_p	$938\ \mathrm{MeV}/c^2 \approx 1836\,m_e$
dipolo magnetico (protone)	μ_p	$2.79\ e\hbar/2m_p c$
dipolo elettrico (protone)		$(-4 \pm 6) \times 10^{-10}\ e\ \mathrm{fm}$
costante di Newton	G_N	$6.67 \times 10^{-11}\ \mathrm{m^3\,kg^{-1}\,s^{-2}}$
massa di Planck	$\sqrt{\hbar c/G_N}$	$1.22 \times 10^{19}\ \mathrm{GeV}/c^2$
massa del Sole	$M_\odot$	$1.99 \times 10^{30}\ \mathrm{kg}$
raggio del Sole	$R_\odot$	$6.96 \times 10^5\ \mathrm{km}$
raggio di Schwartzschild (Sole)	$\rho_S = 2G_N M_\odot/c^2$	$2.95\ \mathrm{km}$
radiazione di fondo	T_0	$2.726 \pm 0.005\ \mathrm{K}$
numero di Avogadro	N_A	$6.022 \times 10^{23}\ \mathrm{mol^{-1}}$
costante di Boltzmann	k	$8.62 \times 10^{-5}\mathrm{eV\,K^{-1}}$
$1\,\mathrm{fm} = 10^{-5}\ \text{Å} = 10^{-13}\mathrm{cm}$	$1\,\mathrm{MeV} = 1.602 \times 10^{-6}\mathrm{erg}$	

TABELLA B-1. *Costanti fisiche utilizzate nel testo.*

APPENDICE C

Rotazioni e momento angolare

Il momento angolare in meccanica quantistica si introduce nel modo più naturale attraverso considerazioni di simmetria. In meccanica classica infatti il momento angolare rappresenta un integrale primo del moto legato alla simmetria di rotazione. Una rotazione spaziale $R_{\mathbf{n},\alpha}$ di un angolo α intorno all'asse individuato dal versore $\mathbf{n}$, nel limite di α piccolo, si può rappresentare con

$$\delta\mathbf{x} = \alpha\{\mathbf{M}\cdot\mathbf{n}\,,\,\mathbf{x}\} \tag{C.1}$$

$$\delta\mathbf{p} = \alpha\{\mathbf{M}\cdot\mathbf{n}\,,\,\mathbf{p}\} \tag{C.2}$$

utilizzando le *parentesi di Poisson*[1]. Ne segue che per una Hamiltoniana invariante per rotazione si ha $\{H, \mathbf{M}\cdot\mathbf{n}\} = 0$. Questa relazione afferma anche che ogni componente del momento angolare è costante nel tempo, dal momento che le equazioni di Hamilton implicano

$$\frac{d}{dt}\,f(q,p) = \{H, f\} \tag{C.3}$$

(in modo del tutto analogo si riconosce che il *momento lineare* è legato alle traslazioni).

In Meccanica Quantistica si introduce il momento angolare richiedendo che sotto una rotazione infinitesimale la variazione del vettore di stato sia espresso da

$$\delta\,|\psi\rangle = \frac{\delta\alpha}{i\hbar}\,\mathbf{M}\cdot\mathbf{n}\,|\psi\rangle \tag{C.4}$$

La ragione del coefficiente $1/i\hbar$ è semplice. Una rotazione, come ogni altra trasformazione di simmetria, deve essere realizzata attraverso una **trasformazione unitaria**. Quindi una *trasformazione infinitesimale*, cioè che differisce di poco dalla identità, deve essere rappresentata dall'operatore identità più un operatore **antihermitiano**. Infatti

$$U = 1 + X \to U\,U^\dagger \approx 1 + X + X^\dagger = 1$$

e cioè $X+X^\dagger = 0$. La costante di Planck è poi necessaria per questioni dimensionali.

Consideriamo ad esempio la rappresentazione di una rotazione per la funzione d'onda $\psi(x,y,z)$ di una particella in tre dimensioni. Allora, se, per esempio,

[1] Vedere [**LL65, Gol50, CS60**].

consideriamo una rotazione infinitesimale attorno all'asse z, troviamo

$$(R_{z,\delta\alpha}\,\psi)(x,y,z) = \psi(x+\delta\alpha\, y,\; y-\delta\alpha\, x,\; z)$$
$$\approx \psi(x,y,z) + \delta\alpha\,\left(y\,\partial/\partial x - x\,\partial/\partial y\right)\,\psi(x,y,z)$$

e quindi

$$\delta\psi(x,y,z) = -i\,\delta\alpha/\hbar\, M_z\,\psi(x,y,z)$$

e cioè la trasformazione infinitesimale è realizzata applicando alla funzione d'onda l'operatore

$$M_z = x\,p_y - y\,p_x$$

(in generale per una rotazione intorno all'asse $\mathbf{n}$ l'operatore sarà dato da $\mathbf{n}\cdot\mathbf{M}$).

Esercizio 1 []Dimostrare che una generica rotazione infinitesimale è data da $\delta\mathbf{x} = \delta\alpha\,\mathbf{n}\wedge\mathbf{x}$ e quindi $\delta\psi(x,y,z) = \delta\alpha\,\mathbf{n}\cdot\mathbf{x}\wedge\nabla\psi(x,y,z)$.

C.1. Rotazioni finite

Una rotazione finita si può pensare come l'applicazione successiva (o prodotto) di infinite trasformazioni infinitesimali, perciò si avrà in generale

$$\mathcal{R}_{\mathbf{n},\alpha}\,|\psi\rangle = \lim_{N\to\infty}\left(\mathbf{1} - i(\alpha\,\mathbf{n}\cdot\mathbf{M}/\hbar)/N\right)^N\,|\psi\rangle = \exp\{-i\alpha\,\mathbf{n}\cdot\mathbf{M}/\hbar\}\,|\psi\rangle\ .$$

Per quanto si è detto, il legame con le rotazioni spaziali suggerisce caso per caso quale debba essere la rappresentazione del momento angolare. Per una funzione d'onda $\psi(x,y,z)$ scalare, che si trasforma sotto cambiamenti di riferimento nel modo più semplice

$$(\mathcal{R}_{\mathbf{n},\alpha}\,\psi)\,(x,y,z) \equiv \psi(R_{\mathbf{n},-\alpha}(x,y,z))$$

il momento angolare è dato da una formula identica a quella della meccanica classica $\mathbf{M} = \mathbf{x}\wedge\mathbf{p}$. Per un sistema di N particelle si avrà

$$(\mathcal{R}_{\mathbf{n},\alpha}\,\psi)\,(\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_N) \equiv \psi(R_{\mathbf{n},-\alpha}\mathbf{x}_1,\ldots,R_{\mathbf{n},-\alpha}\mathbf{x}_N)$$

e di conseguenza il *momento angolare totale* sarà dato dalla somma dei momenti angolari $\sum_k \mathbf{x}_k\wedge\mathbf{p}_k$. Più avanti vedremo che si possono avere espressioni più complicate che coinvolgono il *momento angolare intrinseco* o **spin** delle particelle.

Esercizio 2 []Determinare l'espressione esplicita di una rotazione intorno a un asse individuato dal versore $\mathbf{n}$.

Dimostrazione. [Soluzione:] Un qualunque vettore $\mathbf{x}$ si può suddividere in una parte $\mathbf{x}_\parallel$ parallela a $\mathbf{n}$ (che non subisce variazione nella rotazione) e in una parte ortogonale $\mathbf{x}_\perp$. Per questa si può applicare la formula che rappresenta una rotazione nel piano, tenendo conto che una base nel piano ortogonale a $\mathbf{n}$ è individuata da $\mathbf{x}_\perp$ e da $\mathbf{n}\wedge\mathbf{x}_\perp$. Dunque il vettore ruotato $R_{\mathbf{n},\alpha}\,\mathbf{x}$ è dato dalla somma di $\mathbf{x}_\parallel$ con

$$\mathbf{x}_\perp\cos\alpha + \mathbf{n}\wedge\mathbf{x}_\perp\,\sin\alpha\ .$$

Si ottiene allora

$$R_{\mathbf{n},\alpha}\,\mathbf{x} = \mathbf{x}_\parallel + (\mathbf{x}-\mathbf{x}_\parallel)\,\cos\alpha + \mathbf{n}\wedge\mathbf{x}\,\sin\alpha\ .$$

Ma $\mathbf{x}_{\parallel} = \mathbf{n}\,(\mathbf{n}\cdot\mathbf{x})$. Segue la formula finale

$$R_{\mathbf{n},\alpha}\,\mathbf{x} = \mathbf{x}\cos\alpha + \mathbf{n}\wedge\mathbf{x}\sin\alpha + \mathbf{n}\,(\mathbf{n}\cdot\mathbf{x})(1-\cos\alpha)$$

■

C.2. Relazioni di commutazione

Tenendo conto delle relazioni di commutazione canoniche $[x_j, p_k] = i\hbar\,\delta_{jk}$ è facile ricavare le relazioni seguenti

$$[M_1, M_2] = i\hbar\,M_3$$
$$[M_2, M_3] = i\hbar\,M_1$$
$$[M_3, M_1] = i\hbar\,M_2$$

che si possono esprimere in modo più compatto con

$$[M_j, M_k] = i\hbar\,\varepsilon_{jk\ell}\,M_\ell\ . \tag{C.5}$$

Il simbolo ε è noto come *simbolo di Ricci*, che vale 1 se $\{j,k,\ell\}$ è una permutazione ciclica di $\{1,2,3\}$, vale -1 se $\{j,k,\ell\}$ è una permutazione non ciclica di $\{1,2,3\}$ e vale zero se due indici qualunque coincidono. Ad esempio, il prodotto vettoriale può essere espresso in termini di ε:

$$(\mathbf{a}\wedge\mathbf{b})_j = \varepsilon_{jk\ell}\,a_k\,b_\ell$$

e si sottintende (seguendo la convenzione di Einstein) che si deve sommare su ogni indice ripetuto (nella formula precedente è sottinteso $\sum_{k=1}^{3}\sum_{\ell=1}^{3}$).

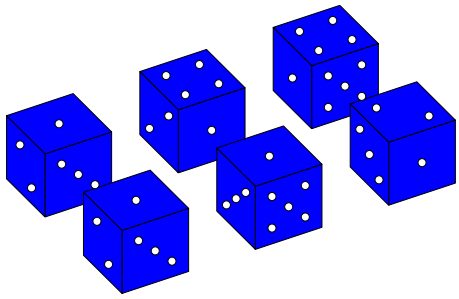
La particolare struttura delle relazioni di commutazione (il commutatore di due componenti qualunque del momento angolare è esprimibile in termini delle medesime componenti) viene chiamata un'*algebra di Lie*. Un altro esempio di una simile struttura è data dalla famiglia di operatori $(a^\dagger\,a,\ a,\ a^\dagger)$ che permette di studiare lo spettro dell'oscillatore armonico.

Esercizio 3 [] Dimostrare che l'insieme di operatori

$$L = \frac{1}{2}(a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2), M = i\frac{1}{2}(a_1^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1), K = \frac{1}{2}(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1)$$

costituisce un'algebra di Lie.

Non è un caso se le componenti del momento angolare soddisfano le regole di commutazione (C.5). Il motivo risiede ancora nella relazione con le rotazioni. Che le rotazioni spaziali *non* soddisfino la proprietà commutativa si può riconoscere con un esempio pratico. Prendete un dado numerato da 1 a 6. Partendo con l'1 a faccia in su e il 2 di fronte, si ruoti intorno alla verticale di 90^0 in senso orario; adesso il 3 è di faccia; si ruoti ora intorno all'asse orizzontale fronte-retro ancora di 90^0 in senso orario, la posizione finale vedrà il due sulla faccia superiore. Se ora invertiamo l'ordine delle rotazioni (prima attorno all'asse fronte-retro e poi attorno alla verticale) la posizione finale vedrà un 4 sulla faccia superiore (vedi figura).



Se consideriamo due rotazioni infinitesimali eseguite successivamente $R_{z,\delta\alpha}\, R_{x,\delta\beta}$ oppure nell'ordine inverso $R_{x,\delta\beta}\, R_{z,\delta\alpha}$, il risultato sarà differente nei due casi. Si può controllare facilmente che che la successione di rotazioni

$$R_{z,\delta\alpha}\, R_{x,\delta\beta}\, R^{-1}_{z,\delta\alpha}\, R^{-1}_{x,\delta\beta}$$

non corrisponde all'identità bensì **a una rotazione intorno all'asse y** di un angolo $\delta\alpha\,\delta\beta$ a meno di correzioni di ordine superiore.

Esercizio 4 []Dimostrare questa affermazione utilizzando la rappresentazione

$$R_{x,\alpha} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}$$

$$R_{y,\alpha} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & 0 & \sin\alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\alpha & 0 & \cos\alpha \end{pmatrix}$$

$$R_{z,\alpha} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

(oppure scrivere un programma di Mathematica per controllare l'affermazione). In particolare ricavare $R_{z,\pi/2}\, R_{x,\pi/2}\, R_{z,-\pi/2}\, R_{x,-\pi/2}$.

Le regole di commutazione (C.5) stanno dunque a segnalare che il momento angolare realizza le rotazioni come trasformazioni unitarie nello spazio degli stati quantistici. In seguito, per un dato sistema fisico, alla domanda "qual'è il momento angolare del sistema?" si risponderà attraverso la contro-domanda "come si trasforma uno stato fisico del sistema sotto rotazioni?". Sapendo questo si identificherà il momento angolare.

C.3. Spettro del momento angolare

Dato che le componenti del momento angolare non commutano, non è possibile diagonalizzare simultaneamente tutti e tre gli operatori M_i. Ciò implica che non esistono stati in cui sia possibile assegnare una direzione precisa al momento angolare. Gli unici stati che sono contemporanemamente autostati di tutti gli

M_i sono quelli invarianti per rotazione, che corrispondono ad autovalore zero per tutte le componenti. Ci si deve perciò limitare a introdurre una base di autovettori per una qualunque componente (per convenzione prendiamo la M_z, riservandoci di scegliere la direzione z in base alla situazione fisica, ad es. nella direzione del campo magnetico, se presente). Oltre a M_z possiamo diagonalizzare anche $M^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2$ che ovviamente commuta con M_z. La determinazione degli autostati ed autovettori si può ottenere per via puramente algebrica, analogamente al caso dell'oscillatore armonico.

Indichiamo con $|\lambda, m\rangle$ gli autostati

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^2\,|\lambda, m\rangle &= \hbar^2\,\lambda\,|\lambda, m\rangle \\ M_z\,|\lambda, m\rangle &= \hbar\, m\,|\lambda, m\rangle \end{aligned} \tag{C.6}$$

(λ e m sono adimensionali). Introduciamo gli operatori M_+, M_-, che risultano analoghi agli operatori di creazione e annichilazione:

$$M_+ = M_x + iM_y,\ M_- = M_x - iM_y\ . \tag{C.7}$$

Si verifica facilmente che in termini di M_z, M_+, M_-, le regole di commutazione divengono

$$\begin{aligned} [M_z, M_+] &= \hbar\, M_+ \\ [M_z, M_-] &= -\hbar\, M_- \\ [M_+, M_-] &= 2\hbar\, M_z \end{aligned}$$

e quindi M_+ e M_- agiscono in modo simile agli operatori di creazione e annichilazione. Se applichiamo M_+ a un autovettore $|\lambda, m\rangle$ si avrà in alternativa: o $M_+\,|\lambda, m\rangle = 0$ oppure $M_+\,|\lambda, m\rangle$ rappresenta un autovettore di M_z con autovalore $\hbar(m+1)$. Analogamente il vettore $M_-\,|\lambda, m\rangle$ o si annulla oppure rappresenta un autovettore di M_z con autovalore $\hbar(m-1)$. Applicando successivamente M_+ e M_- un numero arbitrario di volte possiamo costruire altri autostati con autovalore $\hbar(m+r)$ o $\hbar(m-s)$ con r, s interi. Il punto è che r e s non possono essere grandi a piacere. Infatti M_z non può avere autovalori arbitrariamente grandi per un dato valore di $\mathbf{M}^2$. Per rendere precisa questa affermazione si consideri che dato che le componenti di $\mathbf{M}$ sono operatori Hermitiani, gli operatori M_+ e M_- sono il coniugato l'uno dell'altro, cioè $M_+ = M_-^\dagger$. I due prodotti $M_+\,M_-$ e M_-M_+ sono perciò Hermitiani e soddisfano le equazioni

$$M_+\,M_- = M_x^2 + M_y^2 + \hbar M_z = \mathbf{M}^2 - M_z^2 + \hbar M_z \tag{C.8}$$

$$M_-\,M_+ = M_x^2 + M_y^2 - \hbar M_z = \mathbf{M}^2 - M_z^2 - \hbar M_z \tag{C.9}$$

Calcolando il valore di aspettazione su $|\lambda, m\rangle$, sfruttando l'Eq. (C.6), si trova

$$\langle\lambda, m|\,M_+\,M_-\,|\lambda\, m\rangle = \hbar^2\,(\lambda - m^2 + m) \tag{C.10}$$

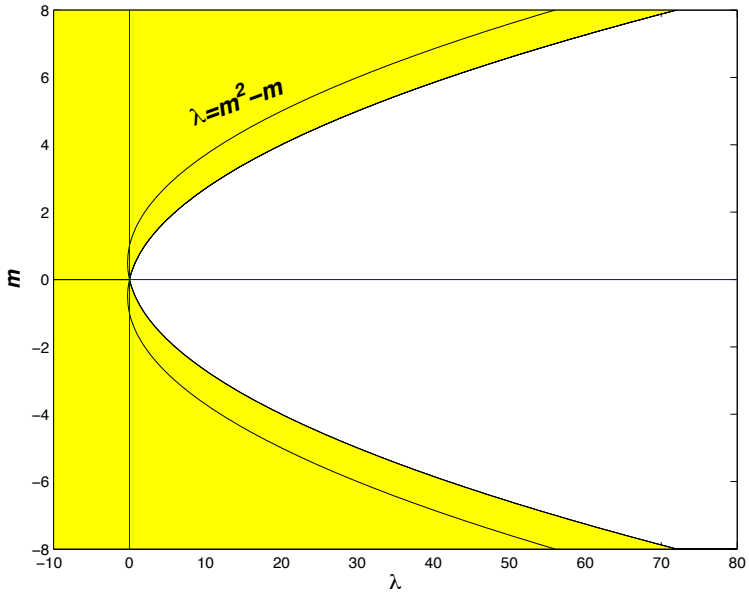
$$\langle\lambda, m|\,M_-\,M_+\,|\lambda\, m\rangle = \hbar^2\,(\lambda - m^2 - m) \tag{C.11}$$

Però gli operatori $M_+\,M_-$ e $M_-\,M_+$ sono *positivi definiti*. Infatti per qualunque operatore A, il valore di aspettazione $\langle\psi|\,A^\dagger\,A\,|\psi\rangle$ coincide con *la norma* del

vettore $A|\psi\rangle$, e dunque deve essere non–negativo. Ne segue che gli autovalori λ e m devono rispettare le disuguaglianze

$$\lambda \geq m^2 - m\,,\ \lambda \geq m^2 + m\,, \tag{C.12}$$

che individuano una regione nel piano λ, m come intersezione tra due parabole con asse orizzontale:



Notare che introducendo il nuovo parametro j tale che $\lambda = j(j+1)$, le disuguaglianze divengono semplicemente $j \geq |m|$.

Ora si possono tirare le somme da tutti gli elementi presenti: l'applicazione successiva di M_+ a un dato autovettore $|\lambda, m\rangle$ deve a un certo punto dare un vettore nullo altrimenti si violerebbe la diseguaglianza Eq.(C.12). Sia r l'intero tale che $M_+^r|\lambda, m\rangle \neq 0$, ma $M_+^{r+1}|\lambda, m\rangle = 0$. Analogamente sia s tale che $M_-^s|\lambda, m\rangle \neq 0$, ma $M_-^{s+1}|\lambda, m\rangle = 0$. Si trova allora (utilizzando l'Eq.(C.10)

$$0 = \langle\lambda, m| M_-^{r+1} M_+^{r+1} |\lambda, m\rangle = \langle\lambda, m| M_-^r (M_- M_+) M_+^r |\lambda, m\rangle \propto \lambda - (m+r)(m+r+1)$$
$$0 = \langle\lambda, m| M_+^{s+1} M_-^{s+1} |\lambda, m\rangle = \langle\lambda, m| M_+^s (M_+ M_-) M_-^s |\lambda, m\rangle \propto \lambda - (m-s)(m-s-1)$$

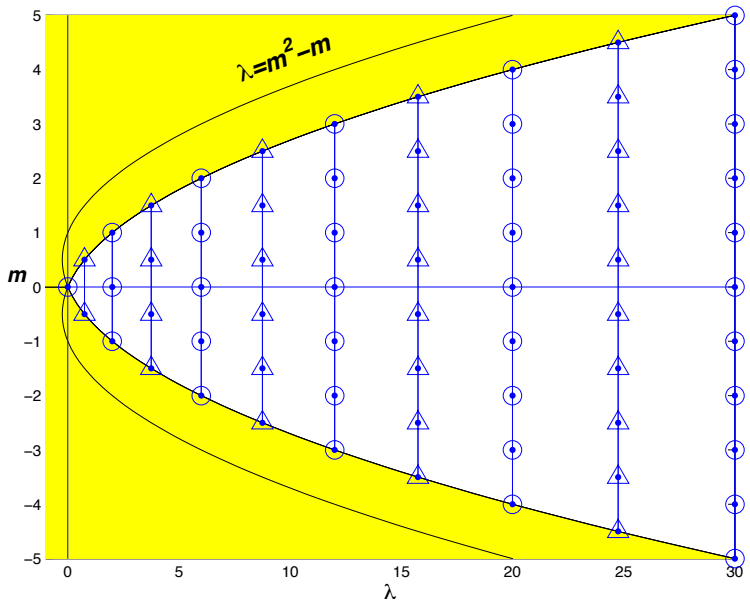
e perciò

$$\lambda = (m+r)(m+r+1) = (m-s)(m-s-1) \tag{C.13}$$

Cancellando il termine m^2 si trova $2m(r+s+1) = s(s+1) - r(r+1) \Rightarrow m = \dfrac{1}{2}(s-r)$. Questo mostra che $2m$ deve essere un intero. Inoltre $\lambda = \frac{s+r}{2}(\frac{s+r}{2}+1)$. Indichiamo con $2j$ il numero intero $r+s$. In definitiva lo spettro è dato da

$$\lambda = j(j+1),\ m = -j, -j+1, ..., j-1, j \quad (2j \in \mathbb{Z}) \tag{C.14}$$

in totale $2j+1$ valori distinti per m per ogni valore di λ. In seguito è conveniente individuare gli autostati con j anzichè con λ, quindi scriveremo gli autovettori come $|j, m\rangle$.



È importante distinguere tra valori interi di j (indicati in figura con un cerchio) e quelli semi-interi (triangoli). Per un dato sistema fisico non tutti gli autovalori saranno presenti. Ad esempio, nel caso del moto in campo centrale, il momento angolare è dato dall'operatore

$$\mathbf{M} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{p}$$

e ammette solo valori interi per j. Ciò si verifica immediatamente in quanto la componente z è identificata con $-i\hbar\partial/\partial\varphi$ e le sue autofunzioni sono $\exp(im\varphi)$ con m intero; valori non interi di m darebbero luogo a funzioni discontinue. Gli autostati $|\ell, m\rangle$ sono rappresentati come funzioni di $\{r, \theta, \varphi\}$ dalle *armoniche sferiche* Y_ℓ^m. È facile ottenere una rappresentazione esplicita di queste, sfruttando la proprietà

$$M_+ |\ell, \ell\rangle = 0$$

Se esprimiamo M_+ e M_- in termini di coordinate cartesiane si ottiene

$$\begin{aligned} M_+ &= 2z\frac{\partial}{\partial \bar{w}} - w\frac{\partial}{\partial z} \\ M_- &= -2z\frac{\partial}{\partial w} + \bar{w}\frac{\partial}{\partial z} \end{aligned} \tag{C.15}$$

avendo introdotto per comodità la coordinata complessa $w = x + iy$. L'autostato $|\ell, \ell\rangle$, annichilato da M_+, è ovviamente[2]

$$Y_\ell^\ell = w^\ell$$

e le autofunzioni corrispondenti a valori inferiori di M_z si ottengono applicando l'operatore M_-.

C.3.1. Normalizzazione. Dalle relazioni (C.8) segue che valgono le relazioni seguenti:

$$M_+ |j\, m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\ |j\, m+1\rangle \tag{C.16}$$

$$M_- |j\, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\ |j\, m-1\rangle \tag{C.17}$$

per cui si ottengono gli autovettori normalizzati secondo la relazione:

$$|j\, m-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{(j+m)(j-m+1)}}\, M_- \ |j\, m\rangle \tag{C.18}$$

Nella rappresentazione in termini di $\{w, \bar{w}, z\}$ otteniamo ad es.:

$$\begin{aligned} Y_\ell^\ell &= w^\ell \\ Y_\ell^{\ell-1} &= -\sqrt{2\ell}\, z\, w^{\ell-1} \\ Y_\ell^{\ell-2} &= (2z^2(\ell-1) - w\bar{w})\, w^{\ell-2} \sqrt{\frac{\ell}{2\ell-1}} \\ \ldots\ldots \end{aligned}$$

C.3.2. Armoniche sferiche. Per ottenere una formula chiusa che esprime le armoniche sferiche $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ si può procedere come segue (si veda anche [**Mes62**], Vol.II).

Partendo da $Y_\ell^\ell = w^\ell$ e applicando M_- più volte si ottengono le armoniche sferiche come polinomi in $z, w, \bar{w}$. La struttura generale del polinomio è ovviamente

$$Y_\ell^m = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} c_{\alpha,\beta,\gamma}^{\ell,m} w^\alpha \bar{w}^\beta\, z^\gamma$$

ma si può sfruttare il fatto che il polinomio è *omogeneo di grado* ℓ (dunque $\alpha + \beta + \gamma = \ell$). Imponendo che Y sia autofunzione di $M_z = w\partial_w - \bar{w}\partial_{\bar{w}}$, si ottiene inoltre $\alpha - \beta = m$. In conclusione la forma di Y si riduce a

$$Y_\ell^m = \sum_\gamma c_\gamma\, z^\gamma\, w^{\frac{1}{2}(\ell+m-\gamma)}\, \bar{w}^{\frac{1}{2}(\ell-m-\gamma)}, \tag{C.19}$$

che risulta equivalente a

$$Y_\ell^m = P_\ell^m(z)\, (w/\bar{w})^{m/2} \tag{C.20}$$

[2] Se la cosa non risulta evidente, si consideri si veda l'appendice A

dal momento che $w\bar{w} = (\sin\theta)^2 = 1 - z^2$. Per le funzioni $P_\ell^m(z)$ si può ottenere a questo punto una relazione di ricorrenza:

$$\begin{aligned} M_- Y_\ell^m &= \bar{w}\frac{dP_\ell^m}{dz}(w/\bar{w})^{\frac{1}{2}m} - 2zP_\ell^m\frac{m}{2w}(w/\bar{w})^{\frac{1}{2}m} \\ &= \left(\sqrt{w\bar{w}}\,\frac{dP_\ell^m}{dz} - \frac{mz}{\sqrt{w\bar{w}}}P_\ell^m\right)(w/\bar{w})^{\frac{1}{2}(m-1)} \end{aligned} \tag{C.21}$$

Ciò mostra che

$$P_\ell^{m-1} = \sqrt{1-z^2}\,\frac{dP_\ell^m}{dz} - \frac{mz}{\sqrt{1-z^2}}P_\ell^m$$

Conviene riscrivere la relazione di ricorrenza facendo uso dell'identità

$$\sqrt{1-z^2}\,\frac{d}{dz} - \frac{mz}{\sqrt{1-z^2}} = (1-z^2)^{\frac{1}{2}(1-m)}\,\frac{d}{dz}\,(1-z^2)^{\frac{1}{2}m}$$

Si noti che per la particolare struttura dei fattori $(1-z^2)$, questi si cancellano nella applicazione successiva di M_- lasciando infine

$$P_\ell^m = \mathcal{N}\,(1-z^2)^{-\frac{1}{2}m}\left(\frac{d}{dz}\right)^{\ell-m}(1-z^2)^\ell$$

che è la ben nota definizione delle *funzioni di Legendre*. La normalizzazione corretta deve tenere infine conto della normalizzazione del vettore di partenza $|\ell,\ell\rangle$ e del fattore introdotto nell'Eq. (C.16): ciò porta a

$$\mathcal{N} = \frac{1}{2^\ell \ell!}\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}}$$

Esercizio 5 []Dimostrare la relazione di commutazione $[M_+, M_-] = 2M_z$ utilizzando la rappresentazione dell'Eq.(C.18).

Esercizio 6 []Dimostrare la formula per $\mathcal{N}$ partendo dall'integrale

$$\int_{-1}^{1}(1-\xi^2)^\ell dx = 2^{2\ell+1}\ell!^2/(2\ell+1)!\,,$$

come si trova su [**GR65**], 3.631.

C.3.3. Perché "armoniche"? Le autofunzioni che abbiamo ricavato nel capitolo precedente sono note come "armoniche sferiche". Sono identificate come

$$Y_\ell^m = \mathcal{N}_{\ell m}\,P_\ell^m(\cos\theta)\,e^{im\varphi}$$

e risultano ortogonali rispetto al prodotto scalare

$$\int_0^\pi \sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\,\bar{Y}_\ell^m\,Y_{\ell'}^{m'} = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\,.$$

La denominazione discende dal fatto che queste funzioni rappresentano la dipendenza angolare delle soluzioni polinomiali dell'equazione di Laplace

$$\Delta\left(f(r)\,Y(\theta,\varphi)\right) = 0$$

cercando soluzioni in forma di polinomi omogenei di grado ℓ. La ragione di questo risale al fatto che l'equazione di Laplace è invariante di scala, cioè se $u(x, y, z)$ è soluzione dell'equazione, anche $u(\lambda x, \lambda y, \lambda z)$ è soluzione. Di conseguenza si possono cercare soluzioni che siano autofunzioni dell'operatore di dilatazione. Introducendo la coordinata complessa $w = x + iy$ già utilizzata in precedenza, il Laplaciano viene espresso come $\Delta = (\partial/\partial z)^2 + 4\,(\partial/\partial w)\,(\partial/\partial \bar{w})$. Si ottiene perciò l'equazione

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + 4\,\frac{\partial}{\partial w}\,\frac{\partial}{\partial \bar{w}}\right)\sum_{n,k} c_{nk}\, z^{\ell-n-k}\, w^n\, \bar{w}^k = 0$$

ossia

$$\sum c_{nk}\Big((\ell - n - k)(\ell - n - k - 1)\, z^{\ell-n-k-2}\, w^n\, \bar{w}^k \\ + n\,k\, z^{\ell-n-k}\, w^{n-1}\, \bar{w}^{k-1}\Big) = 0$$

che porta a una relazione di ricorrenza per i coefficienti c_{nk}:

$$c_{n+1\,k+1} = -\frac{(\ell - n - k)(\ell - n - k - 1)}{(n+1)(k+1)}\, c_{nk}$$

In conclusione, una qualunque soluzione dell'equazione di Laplace, omogenea di grado ℓ si potrà determinare fissando il valore arbitrario del coefficiente c_{n0} (o di c_{0n}) e ricavando poi i coefficienti $c_{n+j\,j}$ ($c_{j\,n+j}$) applicando la relazione di ricorrenza. Le soluzioni linearmente indipendenti corrispondono alla scelta dei $2\ell + 1$ coefficienti arbitrari $c_{\ell 0}, c_{\ell-1\,0}, \ldots, c_{10}, c_{00}, c_{01}, \ldots, c_{0\,\ell-1}, c_{0\,\ell}$. La determinazione esplicita delle soluzioni è tuttavia più agevole seguendo il metodo utilizzato in precedenza.

C.4. Spin

Il momento angolare dell'equazione di Schroedinger $\mathbf{x} \wedge \mathbf{p}$ assume valori interi $\ell = 0, 1, 2, \ldots$. Ci si chiede allora se lo spettro che abbiamo trovato per via puramente algebrica, che prevede anche valori semi-interi, abbia applicazioni in meccanica quantistica. Dalla considerazione del sistema periodico degli elementi appare evidente che è necessario ammettere che ogni stato dell'atomo di idrogeno $\psi_{n\ell m}$ sia degenere due volte. In base al principio di Pauli si spiega allora la serie H (1s), He (1s1s, entrambi gli elettroni nello stato fondamentale), Li (1s1s2s), etc. Si assegna allora all'elettrone un grado di libertà "interno" avente due valori possibili. Fin dal primo momento, ancora prima della formulazione della meccanica quantistica, si era individuato questo grado di libertà quale un momento angolare intrinseco dell'elettrone. Perchè questo abbia due valori possibili bisogna ammettere che il momento angolare intrinseco abbia autovalore $\frac{1}{2}\hbar$. A questo si attribuisce il nome di **spin**, termine che si usa per indicare ad esempio il moto rotatorio di una trottola. Lo spin dell'elettrone ha un valore fissato. Nessuna interazione può modificarlo. Rappresenta una proprietà intrinseca dell'elettrone sullo stesso piano della carica elettrica e della massa. Lo stato

dell'elettrone è allora determinato da una funzione d'onda del tipo

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}, t) \\ \psi_2(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} \tag{C.22}$$

che prende il nome di *spinore*. le due componenti corrispondono ai valori $\pm\frac{1}{2}\hbar$ della componente z dello spin. Il momento angolare dell'elettrone è perciò costituito dalla parte *orbitale* $\mathbf{x} \wedge \mathbf{p}$ più il suo momento di spin che indicheremo con $\mathbf{s}$:

$$\mathbf{J} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{p} + \mathbf{s} \ . \tag{C.23}$$

Sotto una rotazione infinitesimale di un angolo $\delta\alpha$ attorno all'asse $\mathbf{n}$ lo stato si trasforma così:

$$\delta\psi = \delta\alpha\, \mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\, \psi \tag{C.24}$$

Dall'equazione (C.16) si determina la rappresentazione di $\mathbf{s}$:

$$s_x = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \ s_y = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \ s_z = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \ .$$

Le tre matrici $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ sono note come *matrici di Pauli*.

Una particolarità notevole che caratterizza i momenti angolari semi-interi riguarda il comportamento degli stati sotto rotazione. Si prenda ad esempio lo stato $\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$ e si operi una rotazione intorno all'asse z:

$$\mathcal{R}_{z,\alpha} \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = e^{\alpha M_z / i\hbar} \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = e^{-i\frac{1}{2}\alpha} \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \ .$$

Se in particolare poniamo $\alpha = 2\pi$ otteniamo

$$\mathcal{R}_{z,2\pi} \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = -\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \ .$$

Ciò vale in realtà indipendentemente dallo stato, e cioè $\mathcal{R}_{z,2\pi} \equiv -1$. Ogni vettore di stato con spin semiintero acquista un fattore di fase -1 in seguito a una rotazione di 2π! Dato che gli stati sono definiti a meno di una fase, si può concludere che una rotazione di un angolo giro corrisponde all'identità sugli stati fisici di momento angolare fissato. Tuttavia c'è una conseguenza non banale. Se dovessimo avere una sovrapposizione di stati con momento angolare intero e semi-intero, ciò porterebbe ad esempio

$$\mathcal{R}_{z,2\pi} \left(c_1 \left|\frac{1}{2}, s_z\right\rangle + c_2 \left|1, m_z\right\rangle \right) = -c_1 \left|\frac{1}{2}, s_z\right\rangle + c_2 \left|1, m_z\right\rangle$$

e questo **non è** lo stesso stato di partenza. Dunque se insistiamo che una rotazione di 2π deve lasciare immutato ogni stato fisico (il contrario sarebbe alquanto paradossale), allora dobbiamo concludere che **non devono essere permesse sovrapposizioni lineari di stati a spin intero con stati a spin semintero**.

Questa limitazione al principio di sovrapposizione individua due settori fondamentali (settore bosonico, spin intero, e settore fermionico, spin semi-intero). Particelle a spin semiintero (*fermioni*) sono l'elettrone, i neutrini, i quarks. Sono *bosoni di spin 1* i fotoni, i gluoni, la $(Z, W^{\pm})$, lo Higgs (?), e il gravitone (spin 2).

C.5. Somma di momenti angolari

Come si è visto in precedenza, la funzione d'onda di un elettrone, tenendo conto dello spin, è della forma

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}) \\ \psi_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$$

e le sue proprietà di trasformazione sotto rotazione sono date dalla formula:

$$\mathcal{R}\,\Psi(\mathbf{x}) = \mathcal{U}(R)\,\Psi(R^{-1}\mathbf{x}) \tag{C.25}$$

dove $R = R_{\alpha,\mathbf{n}}$ è la matrice ortogonale che definisce la rotazione e $U(R) = \exp(-i\frac{1}{2}\alpha\,\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$ è la rappresentazione per momento angolare $\frac{1}{2}\hbar$.

Esercizio 7 []Dimostrare la formula seguente:

$$\exp\left(-i\frac{1}{2}\alpha\,\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right) = (\cos\frac{1}{2}\alpha)\,\mathbf{1} - i\,(\sin\frac{1}{2}\alpha)\,\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,.$$

Per una trasformazione infinitesimale vale l'Eq. (C.24)

$$\delta\Psi = -i\,\delta\alpha\,\mathbf{n}\cdot(\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{x}\wedge\mathbf{p})\,\Psi\,.$$

Se il campo di forza che agisce sull'elettrone rispetta la simmetria di rotazione, allora l'Hamiltoniana commuta con il momento angolare totale $\mathbf{J}$ e gli autovalori di quest'ultimo forniscono dei "buoni numeri quantici". Sorge in modo naturale allora il problema di derivare gli autostati del *momento angolare totale* $\mathbf{J} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{x}\wedge\mathbf{p}$ a partire dalla base delle armoniche sferiche. Più in generale si affronta il problema di costruire la base degli autovettori $|J, M\rangle$ del momento angolare totale $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$ a partire dalla base $|j_1\,m_1\,j_2\,m_2\rangle$ in cui sono diagonali gli operatori relativi ai due momenti angolari parziali. Questo costituisce il problema della *somma di momenti angolari*.

Si parte dagli autovettori $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ che soddisfano le relazioni (da qui in avanti poniamo $\hbar = 1$)

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}_1^2\,|j_1\,m_1\,j_2\,m_2\rangle &= j_1(j_1+1)\,|j_1\,m_1\,j_2\,m_2\rangle \\
\mathbf{J}_2^2\,|j_1\,m_1\,j_2\,m_2\rangle &= j_2(j_2+1)\,|j_1\,m_1\,j_2\,m_2\rangle \\
J_{1z}\,|j_1\,m_1\,j_2\,m_2\rangle &= m_1\,|j_1\,m_1\,j_2\,m_2\rangle \\
J_{2z}\,|j_1\,m_1\,j_2\,m_2\rangle &= m_2\,|j_1\,m_1\,j_2\,m_2\rangle
\end{aligned}$$

D'altra parte esisterà invece una base in cui sono diagonali $\mathbf{J}^2$ e J_z, ma a questi operatori possiamo aggiungere anche $\mathbf{J}_1^2$ e $\mathbf{J}_2^2$ che ovviamente commutano con

tutte le componenti di $\mathbf{J}$:

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}^2\,|J\,M\,j_1\,j_2\rangle &= J(J+1)\;|J\,M\,j_1\,j_2\rangle \\
J_z\,|J\,M\,j_1\,j_2\rangle &= M\,|J\,M\,j_1\,j_2\rangle \\
\mathbf{J}_1^2\,|J\,M\,j_1\,j_2\rangle &= j_1(j_1+1)\;|J\,M\,j_1\,j_2\rangle \\
\mathbf{J}_2^2\,|J\,M\,j_1\,j_2\rangle &= j_2(j_2+1)\;|J\,M\,j_1\,j_2\rangle
\end{aligned}$$

Dato che in tutto quello che segue i numeri quantici j_1 e j_2 restano invariati, utilizzeremo i ket con 4 argomenti $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ per gli autostati dei momenti angolari da cui siamo partiti, mentre indicheremo semplicemente con $|J\,M\rangle$ gli autostati del momento angolare totale.
Consideriamo il vettore $|j_1\,m_1\,j_2\,m_2\rangle$ per i valori massimi di m_1, m_2, e cioè $|j_1\,j_1\,j_2\,j_2\rangle$. Questo vettore è autovettore di M con autovalore j_1+j_2 e in più è annichilato da J_+ e dunque è autovettore anche di $\mathbf{J}^2$. Abbiamo identificato il primo vettore della nuova base

$$|J\,M\rangle\big|_{J=M=j_1+j_2} = |j_1\,j_1\,j_2\,j_2\rangle$$

Aiutiamoci con un grafico. Ogni punto nella griglia rappresenta un vettore corrispondente a una coppia di indici (m_1, m_2). Il primo in alto a destra è il vettore appena costruito. A partire da questo possiamo costruire un multipletto di dimensione $2J+1$ applicando successivamente l'operatore di abbassamento J_-.

Al primo colpo si avrà

$$\sqrt{2(j_1+j_2)}\;|j_1+j_2\;j_1+j_2-1\rangle = J_-\,|j_1\;j_1\;j_2\;j_2\rangle = \sqrt{2j_1}\;|j_1\;j_1-1\;j_2\;j_2\rangle + \sqrt{2j_2}\;|j_2\;j_1\;j_2\;j_2-1\rangle\ .$$

La combinazione dei due vettori $|j_1\;j_1-1\;j_2\;j_2\rangle, |j_1\;j_1\;j_2\;j_2-1\rangle$ ortogonale a $J_-\,|j_1\;j_1\;j_2\;j_2\rangle$ è annichilata da J_+ e dunque rappresenta lo stato $|J=j_1+j_2-1,\ M=j_1+j_2-1\rangle$. Da questi possiamo ora costruire altri due stati per applicazione di J_-. Il vettore ortogonale a entrambi rappresenta lo stato $|J=j_1+j_2-2,\ M=j_1+j_2-2\rangle$. Continuando così si vengono a costruire tutti i vettori con $J=j_1+j_2-k$, $k=0,1,2,\ldots$. A un certo punto il numero di stati disponibili non aumenta più (l'applicazione di J_- esaurisce tutti gli stati disponibili) e quindi non è più possibile diminuire ulteriormente l'autovalore di J. Supponiamo il valore minimo di J sia J_{min}. Per capire meglio, si consideri la Fig. 1: le linee tratteggiate indicano i punti con m_1+m_2 costante, dunque corrispondenti ad autostati degeneri di J_z. La degenerazione aumenta da uno a $2j_<+1$ (con $j_< = \min(j_1, j_2)$). Quindi si può continuare ad abbassare J un numero di volte pari a $2j_<$ e quindi il valore minimo di J sarà $j_1+j_2-2j_< = |j_1-j_2|$. Per controllo si può verificare il numero di stati che deve coincidere con $(2j_1+1)(2j_2+1)$. Questo fissa J_{min}:

$$\sum_{j=J_{min}}^{j_1+j_2}(2j+1) = (j_1+j_2+1)^2 - J_{min}^2 = 4j_1j_2 + 2j_1 + 2j_2 + 1$$

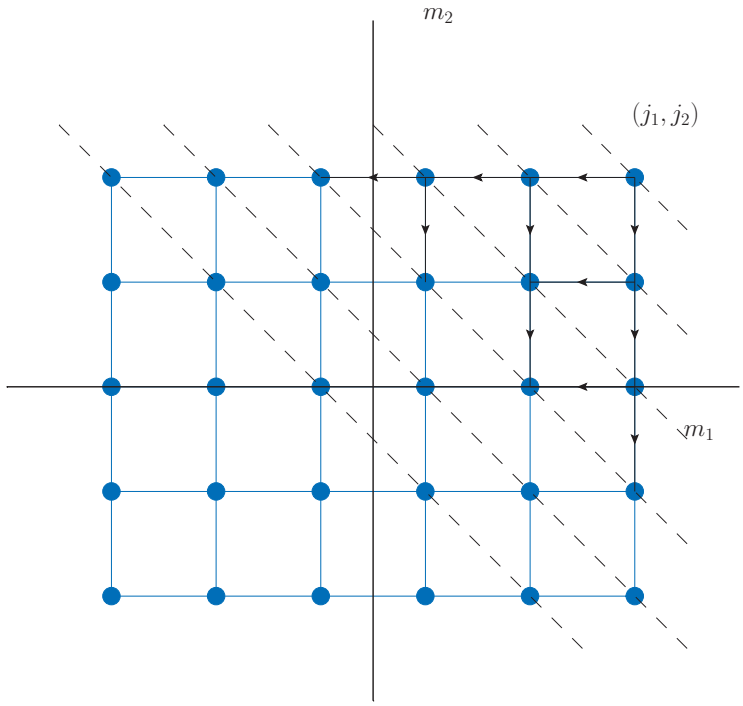
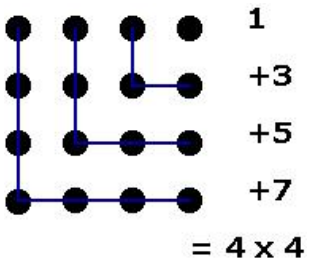


FIGURA C-1. La costruzione della base $|J\ M\rangle$.

da cui si ottiene $J_{min} = |j_1 - j_2|$. Si è utilizzata la profonda identità $\sum_{k=0}^{n-1} (2k+1) = n^2$ ben nota dall'antichità.



C.5.1. Clebsch-Gordan. La trasformazione dalla base $|j_1\ m_1\ j_2\ m_2\rangle$ a quella del momento angolare totale $|J\ M\ j_1\ j_2\rangle$ costituisce una trasformazione unitaria formalmente definita da

$$\langle j_1\ m_1\ j_2\ m_2 | J\ M\ j_1\ j_2\rangle$$

Scriviamo lo stesso valore per j_1 e j_2 a destra e a sinistra in quanto valori diversi avrebbero automaticamente valore zero per l'elemento di matrice; dunque è superfluo indicare esplicitamente j_1 e j_2 nel vettore di momento angolare totale e d'ora in poi i due simboli saranno soppressi, e l'elemento di matrice sarà identificato semplicemente da $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle$. Questi elementi di matrice sono noti come *coefficienti di Clebsch-Gordan*. Il calcolo effettuato sopra mostra ad esempio che

$$\begin{aligned} \langle j_1\ j_1-1\ j_2\ j_2 | j_1+j_2\ j_1+j_2-1 \rangle &= \sqrt{j_1/(j_1+j_2)} \\ \langle j_1\ j_1\ j_2\ j_2-1 | j_1+j_2\ j_1+j_2-1 \rangle &= \sqrt{j_2/(j_1+j_2)} \end{aligned}$$

Come calcolare i coefficienti di Clebsch-Gordan? Il procedimento delineato in precedenza può essere utilizzato ma risulta un pó laborioso. Esistono risultati generali, dovuti a Wigner e Racah [**Ros95**]; in pratica si utilizzano tavole già precompilate (http://pdg.lbl.gov/2004/reviews/clebrpp.pdf), oppure si possono utilizzare programmi automatici (`ClebschGordan[]` in MATHEMATICA). Su CampusNet troverete un programma in matlab basato sulla diagonalizzazione diretta dell'operatore J^2.

C.5.2. $\mathbf{1/2 \otimes 1/2 = 0 \oplus 1}$**.** Il caso più semplice, ma molto importante, è quello della somma di sue spin $\hbar/2$ (i due elettroni dell'atomo di elio). Il momento angolare totale ha valori 0 e 1, e la trasformazione unitaria è data da

$$|0\ 0\rangle = \sqrt{1/2}\Big(|1/2\ 1/2\ 1/2\ -1/2\rangle - |1/2\ -1/2\ 1/2\ 1/2\rangle \Big)$$

$$\begin{cases} |1\ 1\rangle &= \quad |1/2\ 1/2\ 1/2\ 1/2\rangle \\ |1\ 0\rangle &= \sqrt{1/2}\Big(|1/2\ 1/2\ 1/2\ -1/2\rangle + |1/2\ -1/2\ 1/2\ 1/2\rangle \Big) \\ |1\ -1\rangle &= \quad |1/2\ -1/2\ 1/2\ -1/2\rangle \end{cases}$$

Per semplicità, quando è evidente dal contesto che si tratta di due spin $\hbar/2$ le formule precedenti si scrivono in modo più chiaro come

$$|0\ 0\rangle = \frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{\sqrt{2}}, \qquad \begin{cases} |1\ 1\rangle = |++\rangle \\ |1\ 0\rangle = \frac{|+-\rangle + |-+\rangle}{\sqrt{2}} \\ |1\ -1\rangle = |--\rangle \end{cases}$$

il primo vettore a momento angolare totale zero è chiamato un "singoletto" e gli stati a momento angolare totale uno un "tripletto". Si noti che il singoletto risulta **antisimmetrico** rispetto allo scambio dei due momenti angolari, mentre il tripletto è simmetrico. Questo comporta che nella costruzione di stati a due particelle identiche di tipo *fermionico*, come sono le particelle a spin $\frac{1}{2}\hbar$, una funzione d'onda fattorizzata del tipo

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, s_1, s_2) = \psi_{\text{orb}}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)\, \psi_{\text{spin}}(s_1, s_2)$$

dovrà avere la parte orbitale ψ_{orb} simmetrica rispetto allo scambio di $\mathbf{x}_1$ con $\mathbf{x}_2$ nel caso di singoletto e antisimmetrica nel caso di tripletto. Ad es. per lo stato

fondamentale dell'atomo di elio, nell'approssimazione di elettroni indipendenti, si avrà

$$\psi_1(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, s_1, s_2) = \mathcal{N}\, e^{-r_1/a - r_2/a} \left(\delta_{s_1,1/2}\, \delta_{s_2,-1/2} - \delta_{s_1,-1/2}\, \delta_{s_2,1/2}\right)$$

dove $a = \hbar^2/2me^2$ è il raggio di Bohr per il caso di carica nucleare 2.

*

Appendice A.∞

L'equazione $2z\partial_{\bar{w}} Y - w\partial_z Y = 0$ è lineare del primo ordine e la soluzione è data (si veda [**Gou59**]) da *una funzione arbitraria* degli integrali primi del sistema

$$\frac{d\bar{w}}{2z} = -\frac{dz}{w}$$

e quindi

$$Y = \Phi(w, w\bar{w} + z^2) = \Phi(w, r^2),.$$

Ma se si impone che Y sia autofunzione di M_z con autovalore ℓ si trova $Y = f(r)w^\ell$. Il fattore $f(r)$ non entra nelle considerazioni che seguono l'Eq.(C.15).

Parte 4

Problemi

PROB 1 []Tenendo conto dell'espressione dell'energia di un pianeta in termini delle variabili d'azione discutere la variazione dell'energia dovuta ad una lenta diminuzione della massa del Sole (lenta rispetto al periodo di rivoluzione - si invochi il principio adiabatico).

PROB 2 []Si riprenda in esame il Probl. 3.2-7 e lo si risolva facendo uso del vettore di Runge-Lenz.

PROB 3 []Scrivere le equazioni del moto per una particella vincolata a scivolare senza attrito su una superficie sferica sotto l'azione della forza di gravità. Discutere le proprietà generali del moto facendo uso della conservazione dell'energia e della componente del momento angolare nella direzione del campo di gravità.

PROB 4 []Si considerino due pendoli identici di massa m e lunghezza l che compiono piccole oscillazioni con frequenza ω. I due pendoli sono accoppiati da una molla con modulo di elasticità k. All'istante iniziale si pone in movimento uno dei due pendoli discostandolo di un angolo ϑ_0 dalla sua posizione di equilibrio mentre l'altro pendolo è tenuto in posizione verticale. Si ricavi il moto del sistema in funzione del tempo. Se il modulo k per qualche motivo tende a diminuire nel tempo (molto lentamente rispetto al periodo di oscillazione) che cosa si può prevedere per la dipendenza dal tempo dell'energia totale?

PROB 5 []Sia H l'Hamiltoniano di un sistema quantomeccanico; si sa che l'osservabile X commuta con H mentre l'altra osservabile Y soddisfa a

$$[H, Y] = i\, X$$

Dimostrare che $Z = i\,[X, Y]$ è a sua volta una costante del moto e fornire un esempio concreto dei tre operatori H, X, Y.

PROB 6 [] Si studi lo spettro dell'operatore

$$H = a^\dagger a + \lambda(a^{\dagger 2} a + a^\dagger a^2) + a^{\dagger 2} a^2$$

al secondo ordine in teoria delle perturbazioni nel parametro λ. Dimostrare inoltre (con un calcolo esatto) che nel caso $\lambda = 1$ lo stato fondamentale è degenere.

PROB 7 []Discutere lo spettro di una particella in una "buca di potenziale" (in una dimensione) di ampiezza $2a$ e profondità V_0 ($V = -V_0\,\theta(|x| < a)$) nel limite in cui $V_0 \to \infty, a \to 0$ con $V_0 a = b$ fissato. Ricavare le condizioni al contorno cui soddisfa la funzione d'onda al limite $a \to 0$.

PROB 8 []Si consideri il problema di una particella quantistica in un solo grado di libertà soggetta ad una "buca di potenziale" come al problema precedente. Se la particella si trova inizialmente nello stato rappresentato da un pacchetto d'onde gaussiano

$$\psi(x, t = 0) = A \exp\left\{-\frac{(x - x_0)^2}{4\sigma} - i k_0 x\right\}$$

con A, k_0, x_0 e σ costanti reali positive, valutare la probabilità che una misura dell'energia all'istante $t > 0$ dia un valore negativo corrispondente allo stato fondamentale. Si approssimino le formule ottenute nel caso in cui $x_0 >> a$. *La probabilità richiesta dipende dal tempo $t > 0$ a cui si effettua la misura dell'energia?*

PROB 9 []Si consideri una particella di massa m (in una dimensione) soggetta ad un potenziale

$$V(x) = -\lambda_1 \delta(x - x_0) - \lambda_2 \delta(x + x_0)$$

dove $\lambda_1, \lambda_2, x_0$ sono costanti positive assegnate. Determinare gli stati legati della particella, in particolare valutare la differenza tra i primi due livelli energetici al limite $x_0 \to \infty$ nel caso $\lambda_1 \neq \lambda_2$ e nel caso $\lambda_1 = \lambda_2$.

PROB 10 []Si consideri un atomo di idrogeno in due dimensioni immerso in un campo magnetico trasversale B. Adottando coordinate polari nel piano (r, φ) con momenti coniugati p_r, p_φ, determinare i livelli energetici con il metodo di Bohr-Sommerfeld nel limite di campo debole (si trascuri il termine quadratico in B).

PROB 11 []Si consideri un oscillatore armonico inizialmente nel suo stato fondamentale, descritto in opportune unità di misura dall'Hamiltoniano $H_0 = (p^2 + q^2)/2$. All'istante $t = 0$ l'oscillatore è sottoposto ad una perturbazione esterna che corrisponde ad una Hamiltoniana di interazione $H_I = q \sin \omega t$. Si determini qual'è la probabilità $P(E, t)$ di misurare un'energia $E = n + 1/2$ ad un qualunque istante $t > 0$. Al tempo $t = T = 2\pi/\omega$ la perturbazione viene spenta: la probabilità P(E,t) dipende dal tempo per $t > T$?

PROB 12 []Due oscillatori armonici monodimensionali, di massa m e frequenza rispettivamente ω_1 e ω_2, sono accoppiati tramite il potenziale $V = g x_1 x_2$. Calcolare lo spettro del sistema.

PROB 13 []Una particella di spin $\hbar/2$ e momento magnetico $\vec{\mu} = \frac{1}{2} g \hbar \vec{\sigma}$ si trova immersa in un campo magnetico $\vec{B}$ di direzione costante oscillante nel tempo secondo la legge $\vec{B} = (0, 0, B \sin \omega t)$. Se lo stato iniziale della particella è autostato della componente x dello spin, calcolare la distribuzione di probabilità per tutte le componenti dello spin in funzione del tempo.

PROB 14 []Una particella è descritta dalla Hamiltoniana

$$H = c|\mathbf{p}| + \tfrac{1}{2} K |\mathbf{q}|^2$$

dove c, K sono costanti positive. Discutere la dinamica del sistema secondo la meccanica classica. Valutare lo spettro del sistema applicando una conveniente approssimazione. (L'operatore $|\mathbf{p}|$ si intende definito dalla funzione $\sqrt{\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}}$).

PROB 15 []Valutare la correzione in teoria delle perturbazioni all'energia dello stato fondamentale dell'atomo di idrogeno dovuta ad una perturbazione del tipo

$$V = \frac{\beta}{r^2}$$

con $\beta > 0$ limitandosi al primo ordine in teoria delle perturbazioni.

PROB 16 []Calcolare lo spettro di energia di un atomo di idrogeno perturbato come nel problema precedente senza utilizzare la teoria delle perturbazioni.

PROB 17 []L'Hamiltoniana di un sistema quantomeccanico a un grado di libertà è data da

$$H = \tfrac{1}{2m} p^2 + \tfrac{m}{2} \omega^2 q^2 + \lambda q^4$$

dove q, p sono gli operatori canonici, m, ω, λ sono costanti reali positive. Dimostrare, attraverso considerazioni dimensionali, che ogni livello discreto di energia è rappresentabile con l'espressione

$$E_n = \hbar\omega\Phi_n\left(\frac{\hbar\lambda}{m^2\omega^3}\right)$$

dove Φ_n è un'opportuna funzione analitica. Assumendo nota la funzione Φ_n, calcolare i valori di aspettazione

$$\langle n|\, q^2\, |n\rangle\,,\ \langle n|\, p^2\, |n\rangle\,,\ \langle n|\, q^4\, |n\rangle\,,$$

essendo $|n\rangle$ l'autostato dell'energia appartenente a E_n (applicare il teorema di Feynman-Helmann). Determinare $\Phi_n(x)$ al secondo ordine in teoria delle perturbazioni e applicare il risultato al calcolo dei valori d'aspettazione ottenuti in precedenza.

PROB 18 []Discutere il problema agli autovalori per una particella di massa m in un grado di libertà soggetta al potenziale

$$V = \begin{cases} \lambda\,\delta(x), & |x| < a; \\ +\infty, & |x| \geq a \end{cases}$$

dove $\delta(x)$ è la distribuzione di Dirac, e a, λ sono costanti positive. Discutere inoltre il limite $\lambda \to \infty$.

PROB 19 []Scrivere la forma più generale dello stato fondamentale di un atomo di boro (numero atomico 5) nell'approssimazione di elettroni indipendenti (si trascuri cioè la repulsione coulombiana degli elettroni).

PROB 20 []Un sistema di due particelle a spin zero si trova nello stato

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \mathcal{N} \exp\left\{-\frac{\alpha}{2}|\mathbf{x}_1|^2 - \frac{\beta}{2}|\mathbf{x}_2|^2 + \gamma\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2\right\}$$

Si calcoli il valore di aspettazione del momento lineare e delle componenti del momento angolare delle due particelle.

PROB 21 []Calcolare la correzione ai primi due livelli di energia di un atomo di idrogeno dovuti ad un momento di dipolo elettrico ε del nucleo. Il calcolo sia effettuato al primo ordine in teoria delle perturbazioni.

N.B.: Le funzioni d'onda idrogenoidi normalizzate ψ_{nlm} che interessano sono le seguenti (r espresso in unità atomiche):

$$\psi_{100}(r) = 2e^{-r}\, Y_0^0$$
$$\psi_{200}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-r/2}(1 - \tfrac{1}{2}r)\, Y_0^0$$
$$\psi_{21m}(r) = \tfrac{1}{2\sqrt{6}} r e^{-r/2}\, Y_1^m$$

PROB 22 []Sia $H_0 = p^2/2m + m\omega^2 q^2/2$ l'Hamiltoniana di un oscillatore armonico ad un grado di libertà. Sia $V = a^{\dagger 2} a^2$ una perturbazione, essendo $a = (p - im\omega q)/\sqrt{2m\hbar\omega}$ l'operatore di annichilazione. Trovare la dipendenza funzionale di un generico livello di energia dell'Hamiltoniano $H = H_0 + \lambda V$, e cioè $E_n = \Phi(m, \hbar, \omega, \lambda)$, con semplici considerazioni dimensionali. Calcolare la correzione

al secondo ordine in teoria delle perturbazioni per l'autovalore e per l'autovettore dello stato fondamentale.

PROB 23 []Discutere la dinamica quantistica di un oscillatore armonico avente massa m e frequenza ω soggetto ad una perturbazione che ne modifica la frequenza in modo tale che si ha

$$\omega(t) = \begin{cases} \omega & t \leq 0 \\ \omega + \delta\omega & 0 < t \leq T \\ \omega & T \leq t. \end{cases}$$

Se l'oscillatore si trova nello stato fondamentale per $t < 0$, quale sarà la probabilità di misurare un'energia $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ ad un tempo successivo a T?

PROB 24 []Un elettrone è confinato in una regione cilindrica di lunghezza L e raggio di base R. Il campo elettrico all'interno del cilindro è nullo; è presente invece un campo magnetico di cui si conosce il potenziale

$$\mathbf{A} = \left(-\frac{\Phi y}{x^2 + y^2}, \frac{\Phi x}{x^2 + y^2}, 0\right)$$

Si determini l'Hamiltoniana dell'elettrone e si discuta la natura dello spettro.

PROB 25 []Si discutano i limiti di applicabilità della formula

$$[qp, H] = -i\hbar\left(q\,\frac{\partial H}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial p}\,p\right)$$

suggerita dall'analogia con le parentesi di Poisson. Applicando la formula al caso $H = p^2 + V(q)$ dedurne il teorema del viriale (si sfrutti il fatto che il commutatore ha elementi di matrice nulli sulla diagonale).

PROB 26 [] Si consideri un oscillatore armonico isotropo in due gradi di libertà; l'Hamiltoniano è dato in unità opportune da

$$H = \tfrac{1}{2}\left(p_1^2 + p_2^2 + x_1^2 + x_2^2\right).$$

La generica trasformazione ortogonale

$$\begin{pmatrix} p_1' \\ p_2' \\ x_1' \\ x_2' \end{pmatrix} = \mathbf{R}\begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}\mathbf{R}^t = \mathbb{1}$$

lascia invariante l'Hamiltoniano. Si chiede: $\mathbf{R}$ si può considerare una simmetria di H? (Suggerimento: si richieda che $\mathbf{R}$ lasci invariati anche i commutatori canonici).

PROB 27 []Si consideri il problema di una particella in un grado di libertà che presenta uno spettro di energia puramente discreta E_n. Si assuma valida l'approssimazione semiclassica e si cerchi una espressione approssimata per il potenziale $V(x)$. (Suggerimento: si trovi una interpolazione alla funzione $E(J) = E_n$, $J = n\hbar$ e si cerchi di ricostruire $V(x)$ dalla conoscenza del periodo di oscillazione $T(E) = 2\pi/\omega(E)$, $\omega(E) = dE/dJ$. Se occorre aiuto, consultare [**LL65**]).

PROB 28 []Risolvere l'equazione di Schroedinger per il seguente Hamiltoniano (espresso in coordinate polari nel piano)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle - \frac{k}{r} + \frac{\beta^2}{2m\, r^2 \sin^2 \varphi}.$$

PROB 29 []Una particella libera di massa m si trova al tempo $t = 0$ nello stato descritto dalla funzione d'onda

$$\psi(\mathbf{x}) = \mathcal{N} \frac{\sin k|\mathbf{x}|}{k|\mathbf{x}|}.$$

Determinare il valor medio dell'energia, del momento lineare e del momento angolare. Determinare la funzione d'onda a un tempo qualunque $t > 0$.

PROB 30 []Determinare la correzione ai livelli di energia dell'atomo di idrogeno dovuti al fatto che il protone ha un raggio finito. (Applicare la teoria delle perturbazioni stazionarie al potenziale coulombiano modificato a corte distanze nell'ipotesi che la carica sia distribuita con densità costante in una sfera di raggio r_0 molto minore del raggio di Bohr).

PROB 31 []Qual'è la probabilità di misurare un valore $\hbar/2$ per la componente dello spin dell'elettrone in direzione $\mathbf{n}$ se lo stato è un autostato della componente dello spin in direzione $\mathbf{n}'$? In generale, se il momento angolare totale è $\lambda(l+1)\hbar^2$, qual'è la probabilità di misurare il valore massimo $\hbar l$ per la componente del momento angolare in direzione $\mathbf{n}$ se lo stato è un autostato della componente del momento angolare in direzione $\mathbf{n}'$ corrispondente allo stesso valore?

PROB 32 []L'Hamiltoniano

$$H = -\tfrac{1}{2}\left(\frac{d}{dx}\right)^2 + \frac{3x^2 - a^2}{(x^2 + a^2)^2}$$

ammette l'autofunzione $\phi_0 = \mathcal{N}(x^2 + a^2)^{-1}$ appartenente all'autovalore zero. Esistono stati a energia negativa?

PROB 33 []Sia $H_0 = \sum_{n=0}^{\infty} E_n P_n$ la decomposizione spettrale dell'Hamiltoniano H_0 (spettro puramente discreto). Si consideri la perturbazione $H = H_0 + \varepsilon\, |\xi\rangle \langle\xi|$, essendo $|\xi\rangle$ un qualunque vettore di norma uno. Discutere lo spettro di H in generale e ricavare lo sviluppo perturbativo degli autovalori.

Dimostrazione. La perturbazione costituita da un operatore di rango uno, quale è il proiettore su $|\xi\rangle$, è il caso più semplice possibile di perturbazione. Applicando all'Hamiltoniano la definizione di determinante estesa al caso di operatori infinito-dimensionali, lo spettro è individuato dalle radici dell'equazione

$$\begin{aligned}
0 &= \det\left(H_0 - E\mathbb{1} + \varepsilon\, |\xi\rangle \langle\xi|\right) \\
&= \det\left(H_0 - E\mathbb{1}\right)\ \det\left(\mathbb{1} + \varepsilon\, |\xi\rangle \langle\xi|\, (H_0 - E\mathbb{1})^{-1}\right) \\
&= \det\left(H_0 - E\mathbb{1}\right)\ \left(1 + \varepsilon\, \langle\xi|\, (H_0 - E\mathbb{1})^{-1}\, |\xi\rangle\right) \\
&= 1 + \varepsilon \sum_n \frac{|\langle n|\, \xi\rangle|^2}{E_n - E}\,.
\end{aligned}$$